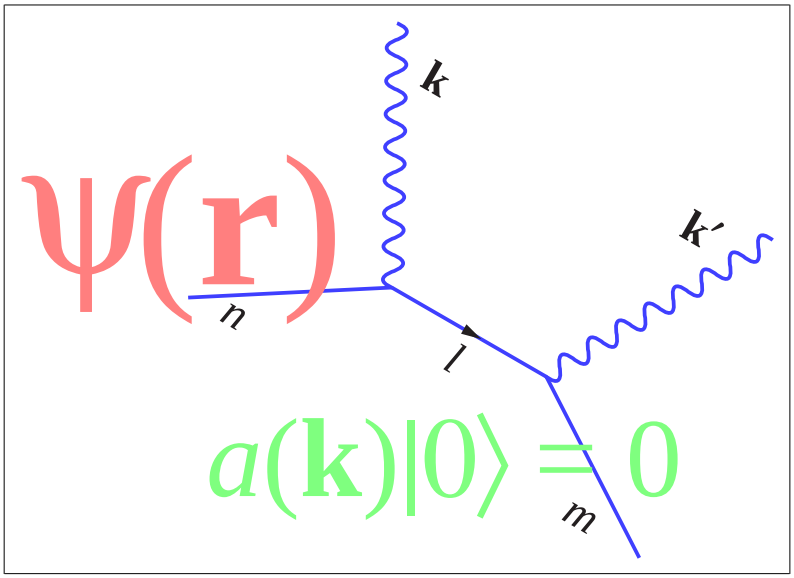
David Sénéchal

MÉCANIQUE QUANTIQUE



NOTES DE COURS
(PHY-731)

Université de Sherbrooke
Faculté des Sciences
Avril 2000

MÉCANIQUE QUANTIQUE

NOTES DE COURS
(PHY-731)

par

David Sénéchal
Professeur
Département de physique

Faculté des Sciences
Université de Sherbrooke
Avril 2000

©2000, David Sénéchal, Faculté des Sciences, Université de Sherbrooke.
Tous droits réservés.

Préface

La nombre d'ouvrages portant sur la mécanique quantique est très grand. Il est cependant difficile d'en trouver un qui réponde à tous les besoins d'un cours de deuxième cycle, dans le cadre d'un programme ayant un penchant pour la physique de la matière condensée. C'est la raison d'être de ce manuel. Son ambition n'est pas de concurrencer les vastes ouvrages généraux sur la mécanique quantique, mais d'effectuer les rappels nécessaires des notions de bases et de les compléter en mettant l'accent sur la deuxième quantification et les systèmes comportant un très grand nombre de degrés de liberté.

Les trois premiers chapitres constituent un rappel des principes de base et de quelques applications standards de la mécanique quantique. Le chapitre 2, sur la théorie de la symétrie, comporte des éléments plus avancés, comme des notions de théorie des groupes. Au chapitre 4, on explique de manière formelle le formalisme de la deuxième quantification, ainsi que l'approximation de Hartree-Fock. Au chapitre 5, on applique ce formalisme à des systèmes d'électrons en interaction dans un réseau cristallin, après une rappel des concepts préliminaires (réseaux, théorème de Bloch, fonctions de Wannier). On y introduit le modèle de Hubbard et la théorie des ondes de spin. Au chapitre 6, on étudie des systèmes d'oscillateurs harmoniques couplés, ce qui mène naturellement à la théorie du champ et à la quantification du champ électromagnétique. On applique ensuite les notions de symétrie à des théories du champ. Ce chapitre constitue une autre avenue, plus naturelle, à la deuxième quantification des bosons. Au chapitre 7, on étudie l'interaction de la lumière avec la matière, dans le formalisme de la deuxième quantification (émission, absorption et diffusion de photons). Au chapitre 8, on introduit la théorie relativiste de l'électron (équation de Dirac) en partant de principes de symétrie (groupe de Lorentz). Enfin, au chapitre 9, on introduit la quantification par intégrale de chemins, ainsi que sa généralisation à des systèmes de bosons et de fermions. On discute aussi de la relation formelle entre la mécanique statistique et la mécanique quantique en temps imaginaire, en particulier pour des systèmes ayant un grand nombre de degrés de liberté.

À la fin de chaque chapitre on trouve un petit nombre d'exercices, de difficultés inégales. Je remercie les étudiants qui ont lu avec attention ces notes de cours dans les années passées et qui ont daigné me signaler des corrections à effectuer. Je livre ce modeste cahier à leurs successeurs, en espérant qu'ils y trouveront matière à réflexion.

CHAPITRE 1

Principes Fondamentaux et Revision

1 Rappels de mécanique classique

1.1 Équations de Lagrange

La configuration d'un système physique à un moment donné est en principe spécifiée par n paramètres réels qu'on peut noter q_i $(i = 1, 2, \ldots, n)$ et qu'on appelle *coordonnées généralisées*. Ces coordonnées décrivent l'*espace des configurations*. La trajectoire du système est alors spécifiée par la dépendance temporelle $q_i(t)$ des coordonnées. Cette trajectoire est déterminée par le principe de la moindre action, qui stipule que le système évolue selon le trajet qui rend l'action stationnaire. L'action S est définie habituellement comme l'intégrale, sur le trajet, de la différence entre l'énergie cinétique et l'énergie potentielle :

$$S = \int \mathrm{d}t \; L(\dot{q}_i, q_i) \qquad L(\dot{q}_i, q_i) = T(\dot{q}_i, q_i) - V(\dot{q}_i, q_i) \tag{1.1}$$

La fonction L porte le nom de lagrangien et dépend des q_i et de leurs dérivées par rapport au temps. La condition que l'action soit stationnaire par rapport à une variation arbitraire $\delta q_i(t)$ de la trajectoire mène aux équations de Lagrange :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \tag{1.2}$$

Cet ensemble d'équations est du deuxième ordre dans le temps, ce qui nécessite pour sa résolution complète la spécification de $2n$ paramètres : les conditions initiales $q_i(0)$ et $\dot{q}_i(0)$.

1.2 Équations de Hamilton

Dans la mécanique dite de Hamilton, l'état d'un système physique ayant n degrés de liberté est spécifié par n coordonnées généralisées q_i $(i = 1, \ldots, n)$ et n moments conjugués (ou impulsions généralisées) p_i. Ces derniers sont définies en fonction du lagrangien comme suit :

$$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \tag{1.3}$$

On définit ensuite la *fonction de Hamilton* ou *hamiltonien*:

$$H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L \tag{1.4}$$

qui peut être exprimé en fonction des q_i et des p_i seulement. Le passage de L vers H effectué par les Éqs (1.3) et (1.4) est un cas particulier de *transformation de Legendre*. L'hamiltonien H représente l'énergie totale du système. L'évolution dans le temps de l'état (la dynamique) est alors donnée par les équations de Hamilton :

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \qquad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \tag{1.5}$$

Les équations de Hamilton sont du premier ordre, ce qui signifie que l'évolution future du système est complètement spécifiée par l'état du système à un moment donné: la spécification des $2n$ quantités (p_i, q_i) au temps $t = t_0$ suffit à déterminer les fonctions du temps $p_i(t)$ et $q_i(t)$.

L'espace mathématique décrit par les $2n$ quantités p_i et q_i porte le nom d'*espace des phases*. Étant données deux fonctions F et G sur cet espace, on définit le *crochet de Poisson* $[F, G]$ comme

$$[F, G] \equiv \sum_i \frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial G}{\partial q_i}\frac{\partial F}{\partial p_i} \tag{1.6}$$

On vérifie que

$$\begin{aligned}
&[F, G] = -[G, F] && \text{(antisymétrie)}\\
&[F, aG + bH] = a[F, G] + b[F, H] && \text{(linéarité)}\\
&[FG, H] = [F, H]G + F[G, H] && \text{(différentiation d'un produit)}\\
&[F, [G, H]] + [G, [H, F]] + [H, [F, G]] = 0 && \text{(identité de Jacobi)}
\end{aligned} \tag{1.7}$$

Les équations de Hamilton deviennent alors

$$\dot{p}_i = [p_i, H] \qquad \dot{q}_i = [q_i, H] \tag{1.8}$$

À l'aide des équations de Hamilton, on montre que la dérivée totale par rapport au temps d'une fonction $F(p_i, q_i, t)$ est

$$\dot{F} = [F, H] + \frac{\partial F}{\partial t} \tag{1.9}$$

où le premier terme provient du déplacement dans l'espace des phases du point (p_i, q_i) où est évaluée la fonction F et le deuxième terme provient de la dépendance explicite de F sur le temps.

En supposant que la fonction F ne dépende pas explicitement du temps, elle sera conservée, c'est-a-dire constante lors de l'évolution temporelle du système, si son crochet de Poisson avec H s'annule : $[F, H] = 0$. Ceci est évidemment vrai de H lui-même, d'où la conservation de l'énergie si H ne dépend pas du temps. Si H ne dépend pas explicitement d'une coordonnée particulière q_j, alors le moment conjuguée p_j sera aussi conservé, comme il est évident d'après les équations de Hamilton.

La description donnée ci-dessus est faite en fonction de variables dites *canoniques*, à savoir les p_i et q_i. On peut toutefois décrire l'espace des phases à l'aide d'autres variables, canoniques ou non. L'important est la définition d'un crochet de Poisson $[F, G]$ satisfaisant aux propriétés (1.7) et d'un hamiltonien H. Cependant, si les variables sont canoniques, l'expression explicite du crochet de Poisson prend la forme simple (1.6) et on a

$$[q_i, p_j] = \delta_{ij} \qquad [p_i, p_j] = [q_i, q_j] = 0 \tag{1.10}$$

1.3 Exemple : oscillateur harmonique simple

L'oscillateur harmonique en une dimension est décrit par une coordonnée x et son lagrangien est

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{1.11}$$

où m est la masse et ω la fréquence (pulsation). L'impulsion correspondante est $p = m\dot{x}$. L'hamiltonien est donc

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{1.12}$$

Les équations de Hamilton sont

$$\dot{p} = -m\omega^2 x \qquad\qquad \dot{x} = p/m \tag{1.13}$$

En combinant ces deux équations en une équation du deuxième ordre on obtient

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0 \quad \Longrightarrow \quad x = x_0 \cos(\omega t) + \frac{p_0}{m\omega}\sin(\omega t) \tag{1.14}$$

où p_0 et x_0 sont les valeurs à $t = 0$ de l'impulsion et de la coordonnée. Naturellement, cette façon de résoudre les équations du mouvement ne tire aucun avantage de la formulation hamiltonienne, puisqu'en combinant les deux équations de Hamilton pour obtenir une équation du deuxième ordre on retourne de ce fait aux équations de Lagrange.

Une autre façon de décrire l'oscillateur harmonique, utilisant cette fois les avantages du formalisme de Hamilton, procède par l'introduction d'une variable complexe a:

$$a \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2}}(x + ip/m\omega) \tag{1.15}$$

On vérifie aisément que

$$H = \omega a^* a \quad \text{et} \quad [a, a^*] = -i \tag{1.16}$$

Ce qui implique les équations du mouvement suivantes :

$$\dot{a} = [a, H] = -i\omega a \quad \Longrightarrow \quad a(t) = a(0)\mathrm{e}^{-i\omega t} \tag{1.17}$$

L'évolution temporelle du conjugué a^* s'obtient naturellement par conjugaison complexe de $a(t)$. Donc la variable a effectue une révolution autour de l'origine du plan complexe, alors que son module carré, proportionnel à l'hamiltonien, demeure constant en raison de la conservation de l'énergie. De par la définition de a on voit que x et p ont des mouvements oscillants dans le temps, déphasés de $\pi/2$.

2 Quantification canonique

Rappelons ici les idées fondamentales de la mécanique quantique telles que décrites par le formalisme dit *canonique*:

2.1 Espace des états

L'état d'un système est décrit non pas par un point dans l'espace des phases, mais plutôt par un vecteur ψ appartenant à un *espace de Hilbert* S appelé *espace des états*. Rappelons la définition d'un espace de Hilbert S:

1. S est un espace vectoriel.
2. S est muni d'un produit hermitique (ψ, ϕ) (ou *produit bilinéaire*) définissant une norme définie positive : $||\psi||^2 \equiv (\psi, \psi) \geq 0$.
3. S est *complet*, c'est-à-dire que chaque suite de Cauchy converge vers une limite appartenant à S. Rappelons qu'une suite $\{\psi_n\}$ est une suite de Cauchy si $\lim_{i,j\to\infty} ||\psi_i - \psi_j|| = 0$.

Rappelons aussi les propriétés du produit hermitique :

- $(\psi, \phi_1 + \phi_2) = (\psi, \phi_1) + (\psi, \phi_2)$
- $(\psi, c\phi) = c(\psi, \phi)$
- $(\psi, \phi) = (\phi, \psi)^*$

Lorsqu'un système physique est formé de l'union de deux systèmes – par exemple, un noyau plus un électron – alors l'espace des états du système total est le produit tensoriel des espaces décrivant les deux sous-systèmes : $S = S_1 \otimes S_2$.

On utilisera couramment la notation de Dirac, dans laquelle on utilise le symbole $|\cdots\rangle$ pour encadrer un élément de S (e.g. $|\psi\rangle$, $|\phi\rangle$) et le symbole $\langle\ |$ pour encadrer un élément de l'espace dual S^*. Rappelons que le dual S^* de S est l'espace des *formes linéaires* agissant sur S. Une forme linéaire est une application linéaire de S vers $\mathbb{C}$. Étant donnée l'existence du produit hermitique (ψ, ϕ) dans S, on peut associer à chaque élément $|\psi\rangle$ de S une forme linéaire dénotée $\langle\psi|$ dont l'action est définie par la relation

$$\langle\psi|\phi\rangle \equiv (\psi, \phi) \tag{2.1}$$

Nous utiliserons désormais la notation $\langle\psi|\phi\rangle$ pour désigner le produit hermitique.

L'espace de Hilbert est généralement décrit à l'aide de *bases orthonormées complètes*. Une telle base est un ensemble $\{|n\rangle\}$ de vecteurs tel que

$$\langle n|m\rangle = \delta_{mn} \qquad\qquad \sum_n |n\rangle\langle n| = 1 \tag{2.2}$$

Rappelons que l'opérateur $|n\rangle\langle n|$ est un opérateur de projection : agissant sur un état $|\psi\rangle$, il le projette sur l'état $|n\rangle$ et n'en conserve que la composante dans cette direction. L'équation de droite ci-haut signifie qu'aucun vecteur de S n'est orthogonal à tous les vecteurs de base et constitue la définition d'un ensemble *complet* de vecteurs. Cette équation porte le nom de *relation de complétude* ou de *fermeture*. Tout état $|\psi\rangle$ peut être exprimé en fonction d'une base orthonormée complète de la manière suivante :

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle \tag{2.3}$$

L'exemple classique d'espace de Hilbert est l'ensemble L^2 des fonctions complexes quadratiquement intégrables $\psi(x)$ définies sur $\mathbb{R}$, avec le produit hermitique

$$(\psi, \phi) \equiv \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}x\ \psi^*(x)\phi(x) \tag{2.4}$$

Par quadratiquement intégrables, on veut dire que la norme (ψ, ψ) est finie. Il s'agit de l'espace des états d'une particule sans spin se déplaçant dans une dimension d'espace. La généralisation à trois dimensions est bien sûr immédiate, alors que la généralisation à un nombre fini de particules se fait simplement par produit tensoriel.

2.2 Observables et opérateurs

Il est bon ici de faire quelques rappels sur les opérateurs hermitiques. Rappelons que l'*adjoint* $A^\dagger$ d'un opérateur linéaire A est défini par la relation $\langle A^\dagger\psi|\psi'\rangle = \langle\psi|A\psi'\rangle$, pour tous les états $|\psi\rangle$, $|\psi'\rangle$. $A^\dagger$ est aussi appelé le *conjugué hermitique* de A. Il est évident que $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ et que $(cA)^\dagger = c^* A^\dagger$, c étant un nombre complexe quelconque. Un opérateur A est dit *hermitique* si $A^\dagger = A$. On montre facilement que les valeurs propres d'un opérateur hermitique sont réelles et que les vecteurs propres associés à des valeurs propres différentes sont orthogonaux. Dans un espace de dimension finie, un opérateur hermitique A est toujours diagonalisable, c'est-à-dire qu'il est possible de former une base orthonormée complète $\{|n\rangle\}$ avec ses vecteurs propres. Dans cette base, l'opérateur A s'exprime ainsi :

$$A = \sum_n a_n |n\rangle\langle n| \tag{2.5}$$

où a_n est la valeur propre associée au vecteur propre $|n\rangle$: $A|n\rangle = a_n|n\rangle$. Dans un espace de dimension infinie, cette propriété n'est pas valable pour tous les opérateurs hermitiques et nous réserverons le nom d'*observables* aux opérateurs hermitiques dont les vecteurs propres forment une base, c'est-à-dire un ensemble orthonormé complet.

Rappelons aussi que si deux observables A et B commutent, c.-à-d. si $[A, B] = 0$, alors il est possible de construire un ensemble de vecteurs propres communs aux deux opérateurs et formant une base. En général un opérateur possède plusieurs vecteurs propres associés à une même valeur propre et donc la valeur propre ne suffit pas à spécifier un état quantique bien déterminé. Pour cette raison on considère des *ensembles complets d'observables qui commutent* (E.C.O.C.). Les opérateurs A, B, C, etc. d'un E.C.O.C. possèdent des vecteurs propres communs, c'est-à-dire qu'ils peuvent être diagonalisés simultanément. Ils forment un ensemble complet, c'est-à-dire que le multiplet de valeurs propres $(a_i, b_j, c_k, \ldots)$ suffit à spécifier un vecteur propre unique. Un exemple d'E.C.O.C. pour l'atome d'hydrogène non relativiste est formé par l'hamiltonien H, le carré $\mathbf{L}^2$ du moment cinétique orbital, le carré $\mathbf{S}^2$ du spin et les composantes L_z et S_z du moment cinétique orbital et du spin.

2.3 Probabilités et processus de mesure

Un autre postulat de la mécanique quantique est qu'une quantité physique (position, impulsion, énergie, moment cinétique, etc.) est représentée par une observable A agissant dans l'espace des états. Les valeurs possibles que cette quantité physique peut admettre sont les valeurs propres de A. Un état physique $|\psi\rangle$ peut toujours être décomposé selon la base des vecteurs propres $\{|n\rangle\}$ d'une observable A et la *probabilité* que la quantité A ait une valeur a_n est proportionnelle à la norme de la projection de $|\psi\rangle$ sur le sous-espace vectoriel associé à la valeur propre a_n. Si un seul vecteur propre $|n\rangle$ est associé à a_n, cela s'exprime ainsi :

$$\mathrm{Prob}(a_n) = \frac{|\langle n|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

On suppose en général que l'état $|\psi\rangle$ est normé ($\langle\psi|\psi\rangle = 1$) de sorte que le dénominateur est unité.

L'interprétation probabiliste de la mécanique quantique est la suivante : Lors du processus de mesure de la quantité A par un appareil macroscopique, l'interaction de l'appareil avec le système microscopique fait en sorte que la valeur a_n est obtenue avec probabilité $|\langle n|\psi\rangle|^2$ et que l'état du système immédiatement après la mesure est l'état propre correspondant $|n\rangle$: c'est l'*effondrement de la fonction d'onde*.[1] Cet effondrement permet de *préparer* des états quantiques, c'est-à-dire de connaître précisément l'état d'un système à la suite de la mesure d'une ou de plusieurs observables qui commutent.

Dans tout état $|\psi\rangle$ la valeur moyenne d'une observable A est

$$\langle A\rangle = \sum_n a_n \mathrm{Prob}(a_n) = \sum_n a_n \langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle \tag{2.6}$$

La variance $(\Delta A)^2$ d'une observable est alors

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 \tag{2.7}$$

Dans un état propre de A, la variance s'annule. La racine carrée ΔA de la variance est l'*écart-type*.

2.4 Quantification canonique

Le passage d'une description classique (dans le formalisme de Hamilton) à une description quantique se fait de la manière suivante : les quantités définies sur l'espace des phases deviennent des opérateurs agissant dans l'espace des états et le crochet de Poisson $[F, G]$ de deux quantités est remplacé par le commutateur des deux opérateurs, fois une constante :

$$[F, G] \qquad \longrightarrow \qquad \frac{1}{i\hbar}(FG - GF) = \frac{1}{i\hbar}[F, G] \tag{2.8}$$

Le facteur de i a pour but de s'assurer que le membre de droite est hermitique si F et G le sont et le facteur $\hbar$ est une constante ayant les dimensions de l'action dont le rôle est de préserver les unités du crochet de Poisson.[2] Notons que cette correspondance satisfait à toutes les propriétés (1.7). Aux variables canoniques p_i, q_j de la mécanique correspondent donc des opérateurs P_i et Q_j obéissant aux relations de commutations suivantes :

$$[Q_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij} \tag{2.9}$$

Les valeurs de deux variables conjuguées Q et P obéissant à $[Q, P] = i\hbar$ ne peuvent être bien déterminées simultanément. On démontre la relation d'incertitude suivante, dans un état arbitraire :

$$\Delta Q \Delta P \geq \frac{1}{2}\hbar \tag{2.10}$$

[1] On peut arguer que l'interprétation de $|\langle n|\psi\rangle|^2$ comme probabilité est compatible avec l'effondrement de la fonction d'onde, en vertu de considérations générales sur l'interaction d'un système microscopique avec un système macroscopique faisant office d'appareil de mesure (voir Gottfried, p. 185 et suivantes). Cet argument fait appel à la notion de *décohérence*.

[2] La constante de Planck réduite $\hbar$ est égale à $1,054.10^{-34}$J.s, ou encore $6,58.10^{-16}$eV.s.

2.5 Évolution temporelle

La quantification canonique d'un système physique ayant un hamiltonien H nous conduit naturellement à l'équation suivante pour l'évolution temporelle d'une quantité physique représentée par un opérateur A:

$$\boxed{\dot{A} = \frac{i}{\hbar}[H, A] + \frac{\partial A}{\partial t}} \tag{2.11}$$

Ceci découle de (1.9) et de (2.8). Nous supposerons habituellement que l'opérateur A ne dépend pas explicitement du temps, de sorte que $\partial A/\partial t = 0$. L'équation ci-haut porte le nom d'équation du mouvement de Heisenberg. Cette évolution temporelle des opérateurs suppose que les états de S n'évoluent pas dans le temps : toute la dynamique est reportée sur les opérateurs. Cette conception de la dynamique est appelée *point de vue de Heisenberg* et sera celle employée dans ce cours la plupart du temps.

Une conception physiquement équivalente, le *point de vue de Schrödinger*, suppose que les opérateurs sont constants, mais que les états varient dans le temps. Les deux points de vue sont reliés par une transformation unitaire (voir chapitre 2). Dans le point de vue de Schrödinger, l'état $|\psi\rangle_S$, affublé d'un indice pour bien indiquer le point de vue, obéit à une équation différentielle du premier ordre : l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle_S = H|\psi(t)\rangle_S \tag{2.12}$$

Si $|\psi\rangle_S$ est un état propre de l'hamiltonien avec valeur propre (énergie) E, alors son évolution temporelle est obtenue par un simple facteur de phase :

$$|\psi(t)\rangle_S = \mathrm{e}^{-iEt/\hbar}|\psi(0)\rangle_S \tag{2.13}$$

Un tel état est qualifié de *stationnaire*.

2.6 Représentation en coordonnées

Une base particulièrement usitée dans la description des états est celle des états propres $|\mathbf{r}\rangle$ de l'opérateur de position $\mathbf{R}$ d'une particule (nous adoptons une notation tridimensionnelle). Le problème est que ces états ne sont pas normalisables, car ils ne sont pas réalisables en pratique : ils demandent une précision infinie dans la position de la particule, alors que la position peut prendre un continuum de valeurs. C'est le problème associé à un spectre continu de valeurs propres. On adopte plutôt la normalisation suivante :

$$\langle \mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad \text{et} \quad \int \mathrm{d}^3r \; |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| = 1 \tag{2.14}$$

La décomposition d'un état $|\psi\rangle$ selon cette base se fait à l'aide de la *fonction d'onde* $\psi(\mathbf{r})$:

$$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}^3r \; \psi(\mathbf{r})|\mathbf{r}\rangle \qquad\qquad \psi(\mathbf{r}) \equiv \langle\mathbf{r}|\psi\rangle \tag{2.15}$$

La condition de normalisation est alors

$$\begin{aligned} \langle\psi|\psi\rangle &= \int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r' \; \psi^*(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r})\langle\mathbf{r}'|\mathbf{r}\rangle \\ &= \int \mathrm{d}^3r \; |\psi(\mathbf{r})|^2 \; = \; 1 \end{aligned} \tag{2.16}$$

Dans la représentation en coordonnées, l'équation de Schrödinger prend la forme suivante, pour un hamiltonien composé de l'énergie cinétique $K = \mathbf{P}^2/2m$ et d'une énergie potentielle $V(\mathbf{R})$ quelconque :

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\mathbf{r})\psi} \tag{2.17}$$

Le module carré $|\psi(\mathbf{r})|^2$ représente la densité de probabilité associée à la particule : la probabilité que la particule soit située dans un volume infinitésimal dV autour de $\mathbf{r}$ est $|\psi(\mathbf{r})|^2 dV$. On peut associer un courant de probabilité $\mathbf{J}$ à cette densité de probabilité, afin que la conservation locale de la probabilité prenne la forme d'une équation de continuité:

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 + \nabla\cdot\mathbf{J} = 0 \tag{2.18}$$

Dans le but de déterminer la forme de $\mathbf{J}$, calculons explicitement le premier terme, en utilisant l'équation de Schrödinger (2.17):

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 &= \dot{\psi}\psi^* + \psi\dot{\psi}^* \\ &= \frac{i\hbar}{2m}\left[\nabla^2\psi\psi^* - \psi\nabla^2\psi^*\right] \\ &= \frac{i\hbar}{2m}\nabla\cdot\left[\nabla\psi\psi^* - \psi\nabla\psi^*\right]\end{aligned} \tag{2.19}$$

Pour que cette expression soit égale à $-\nabla\cdot\mathbf{J}$, le courant doit être

$$\boxed{\mathbf{J} = \frac{\hbar}{2im}\left[\nabla\psi\psi^* - \psi\nabla\psi^*\right]} \tag{2.20}$$

3 Puits et barrières de potentiel en une dimension

Dans cette section nous allons discuter de problèmes élémentaires de mécanique quantique impliquant tous la propagation d'une particule en une dimension, à travers des puits et barrières de potentiels. Dans ce type de situation, l'énergie potentielle est une constante sauf en un nombre fini de points (les interfaces). Le rôle des conditions aux limites et de continuité est alors essentiel. Remarquons que le développement des techniques de nanofabrication a permis de réaliser en pratique des systèmes qui n'étaient auparavant que des curiosités à caractère pédagogique.

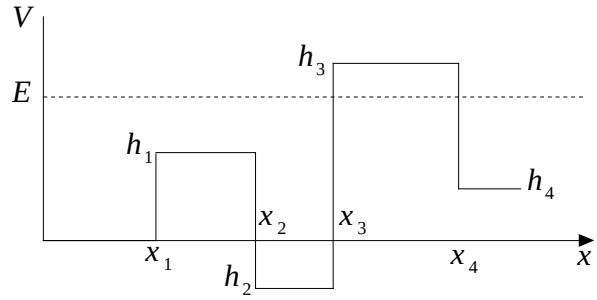


Figure 3.1. Série de barrières et puits de potentiel en une dimension.

3.1 Effet tunnel et matrice de transfert

Considérons le potentiel unidimensionnel illustré sur la figure 1.1. Supposons qu'une particule d'énergie E se dirige vers la droite et rencontre cette série de puits et de barrières. La question est de calculer la probabilité que la particule réussise à traverser ce potentiel (le coefficient de transmission $\mathcal{T}$).

Dans la région qui suit la coordonnée x_n, le potentiel est constant et égal à h_n. La forme la plus générale de la fonction d'onde associée à une état propre d'énergie E dans cette région est

$$\psi_n(x) = u_n \mathrm{e}^{ik_n x} + v_n \mathrm{e}^{-ik_n x} \qquad\qquad k_n = \frac{\sqrt{2m(E-h_n)}}{\hbar} \tag{3.1}$$

Si $E < h_n$, alors k_n est imaginaire et la fonction d'onde est alors une combinaison d'exponentielles croissante et décroissante. Dans le cas contraire ($E > h_n$) il s'agit simplement d'une superposition d'ondes progressives se dirigeant dans les deux sens.

À chaque interface (située à x_n) la fonction d'onde doit satisfaire à deux conditions de continuité: ψ et $\mathrm{d}\psi/\mathrm{d}x$ doivent être continus, afin que le courant de probabilité

$$J = (\hbar/2im)\left[\psi^* \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} - \frac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}x}\psi\right] \tag{3.2}$$

soit continu et qu'aucune probabilité ne soit 'perdue' aux interfaces. Sous forme matricielle, la condition de continuité à l'interface x_n prend la forme suivante :

$$\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{ik_{n-1}x_n} & \mathrm{e}^{-ik_{n-1}x_n} \\ k_{n-1}\mathrm{e}^{ik_{n-1}x_n} & -k_{n-1}\mathrm{e}^{-ik_{n-1}x_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{n-1} \\ v_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{ik_n x_n} & \mathrm{e}^{-ik_n x_n} \\ k_n \mathrm{e}^{ik_n x_n} & -k_n \mathrm{e}^{-ik_n x_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix} \tag{3.3}$$

Appelons M_n et N_n les matrices ci-haut (à gauche et à droite respectivement). En fonction du doublet $C_n \equiv (u_n, v_n)$, la condition de continuité devient $C_{n-1} = M_n^{-1} N_n C_n$. Ceci détermine l'amplitude de l'onde transmise en fonction de l'amplitude des ondes incidente et réfléchie :

$$\begin{pmatrix} 1 \\ v_0 \end{pmatrix} = (M_1^{-1}N_1)(M_2^{-1}N_2)\cdots(M_N^{-1}N_N)\begin{pmatrix} u_N \\ 0 \end{pmatrix} \tag{3.4}$$

Ici nous avons imposé la condition qu'aucune onde ne vient de la droite ($v_N = 0$) et que l'onde incidente est normalisée de la façon habituelle ($u_0 = 1$). On définit la matrice de transfert T comme

$$T \equiv (M_1^{-1}N_1)(M_2^{-1}N_2)\cdots(M_N^{-1}N_N) \tag{3.5}$$

L'amplitude de l'onde transmise est alors $u_N = 1/T_{11}$, alors que l'amplitude de l'onde réfléchie est $v_0 = T_{21}u_N = (T_{21}/T_{11})$.

Le *coefficient de transmission* $\mathcal{T}$ est le rapport du courant de probabilité transmis au courant incident. D'après l'expression du courant donnée plus haut, on trouve $J = (\hbar/m)|u_N|^2\mathrm{Re}\,(k_N)$. Il s'ensuit que $\mathcal{T} = 0$ si k_N est purement imaginaire (c.-à-d. si $E < h_N$). Autrement, le coefficient de transmission est

$$\mathcal{T} = \frac{1}{|T_{11}|^2}\frac{k_N}{k_0} \qquad (E > h_N) \tag{3.6}$$

De même, le *coefficient de réflexion* $\mathcal{R}$ est le rapport du courant réfléchi au courant incident, c.-à-d. $|v_0|^2$:

$$\mathcal{R} = \frac{|T_{21}|^2}{|T_{11}|^2} \tag{3.7}$$

Comme la somme des courants transmis et réfléchi doit être égale à l'unité, on a la relation

$$\mathcal{T} + \mathcal{R} = 1 \quad \text{ou} \quad |T_{11}|^2 - |T_{21}|^2 = \frac{k_N}{k_0} \tag{3.8}$$

D'après l'expression donnée ci-haut pour M_n et N_n, on calcule que la matrice de transfert qui effectue le passage d'une interface est

$$M_n^{-1}N_n = \frac{1}{2k_{n-1}}\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-ik_{n-1}x_n} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{ik_{n-1}x_n} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} k_n + k_{n-1} & -k_n + k_{n-1} \\ -k_n + k_{n-1} & k_n + k_{n-1} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{ik_nx_n} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-ik_nx_n} \end{pmatrix} \tag{3.9}$$

Le déterminant de ce produit est $\det(M_n^{-1}N_n) = k_n/k_{n-1}$. Il s'ensuit que le déterminant de la matrice de transfert complète (associée à N interfaces) est $\det T = k_N/k_0$, ce qui est égal à 1 si les le potentiel retombe à son niveau initial après la barrière.

Chacun des facteurs dans l'Éq. (3.9) est de la forme

$$\begin{pmatrix} a & b \\ b^* & a^* \end{pmatrix} \tag{3.10}$$

si k_n et k_{n-1} sont tous les deux réels (ou tous les deux imaginaires). On vérifie que le produit de deux matrices de ce type donne encore une matrice de ce type : il y a propriété de groupe (cf. Sect. (2.3)). Donc, la matrice de transfert, qui est un produit de matrices de ce type, possède aussi cette propriété: $T_{22} = T_{11}^*$ et $T_{12} = T_{21}^*$. Même si cet argument n'est valable que si E est plus grand que la plus haute des barrières, cette propriété est néanmoins vraie dans tous les cas où $E > h_N$. On voit qu'elle est parfaitement compatible avec la conservation de la probabilité, puisque $\det T = |T_{11}|^2 - |T_{21}|^2 = (k_N/k_0)$, ce qui coincide avec la relation $\mathcal{T} + \mathcal{R} = 1$. D'autre part, si $E < h_N$, on montre plutôt que la matrice de transfert a la propriété suivante : $T_{21} = T_{11}^*$ et $T_{22} = T_{12}^*$, de sorte que le coefficient de réflexion est égal à 1 dans ce cas.

Certaines propriétés de la matrice de transfert peuvent être déduites de considérations élémentaires de symétrie. Considérons premièrement la symétrie de translation. Lorsqu'on procède à une translation $x \to x - a$ dans la fonction d'onde, de sorte que la barrière apparait maintenant à une distance a à droite de sa position avant translation, les coefficients (u_0, v_0) et (u_N, v_N) deviennent $(u_0\mathrm{e}^{-ika}, v_0\mathrm{e}^{ika})$ et $(u_N\mathrm{e}^{-ika}, v_N\mathrm{e}^{ika})$ respectivement. Ici $k_0 = k_N = k$ (on suppose que $h_N = 0$, comme dans tout ce qui suit). Sous forme matricielle, on écrit

$$C_0 \to C_0' = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-ika} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{ika} \end{pmatrix} C_0 \quad C_N \to C_N' = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-ika} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{ika} \end{pmatrix} C_N \tag{3.11}$$

D'autre part, la translation produit une autre matrice de transfert T' telle que $C'_0 = T'C'_N$. Il s'ensuit que la matrice translatée T' est

$$T' = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-ika} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{ika} \end{pmatrix} T \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{ika} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-ika} \end{pmatrix} \tag{3.12}$$

Cette formule permet de traiter facilement des situations où deux barrières identiques (ou plus) apparaissent dans un même complexe.

Enfin, donnons l'expression de la matrice de transfert correspondant à une barrière de potentiel simple, de largeur a et de hauteur h. Posons $q = k_1$ et $k = k_0 = k_2$. On calcule alors que

$$\begin{aligned} T_{11} &= \frac{1}{4kq}\left[\mathrm{e}^{i(k-q)a}(k+q)^2 - \mathrm{e}^{i(k+q)a}(k-q)^2\right] \\ T_{21} &= \frac{(q^2-k^2)}{4kq}\left[\mathrm{e}^{i(k+q)a} - \mathrm{e}^{i(k-q)a}\right] \\ T_{12} &= T_{21}^* \\ T_{22} &= T_{11}^* \end{aligned} \tag{3.13}$$

Dans le cas où $E < h$, on définit $\beta = -iq$ et on obtient le coefficient de transmission suivant :

$$\boxed{\mathcal{T} = \left\{1 + \frac{(k^2+\beta^2)^2}{8\beta^2k^2}\left[\cosh(2\beta a) - 1\right]\right\}^{-1}} \tag{3.14}$$

Dans ce cas, $\mathcal{T}$ est toujours strictement plus petit que 1. Dans la limite $\beta a \gg 1$ – ce qui signifie que l'atténuation de la fonction d'onde à travers la barrière est énorme – le coefficient de transmission se comporte comme $\sim \mathrm{e}^{-2\beta a}$.

3.2 Effet tunnel résonant

Même si le coefficient de transmission $\mathcal{T}$ est toujours inférieur à 1 dans le cas d'une barrrière simple, il est possible de l'augmenter en ajoutant une autre barrière identique à la première, une distance l plus loin. Ceci peut paraître surprenant, mais est possible si la longueur d'onde de de Broglie de la particule incidente coindice à peu près avec la distance entre les barrières : il s'agit d'un phénomène de résonance. En fait, il faut que l'énergie E coincide avec l'énergie d'un état quasi-lié qui existe dans le puits situé entre les deux barrières.

Calculons la matrice de transfert $T_{\text{D.B.}}$ pour la double barrière en fonction de la matrice de transfert T pour la barrière simple. Il s'agit de translater une copie de T par une distance l. On obtient

$$T_{\text{D.B.}} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{21}^* \\ T_{21} & T_{11}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-ikl} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{ikl} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{11} & T_{21}^* \\ T_{21} & T_{11}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{ikl} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-ikl} \end{pmatrix} \tag{3.15}$$

Le calcul de $(T_{\text{D.B.}})_{11}$ est direct :

$$(T_{\text{D.B.}})_{11} = T_{11}^2 + \mathrm{e}^{2ikl}|T_{21}|^2 \tag{3.16}$$

Écrivons $T_{11} = |T_{11}|\mathrm{e}^{-i\theta}$. Alors

$$(T_{\text{D.B.}})_{11} = \mathcal{T}_B^{-1}\mathrm{e}^{-2i\theta}\left\{1 + \mathcal{R}_B\mathrm{e}^{2i(\theta+kl)}\right\} \tag{3.17}$$

où $\mathcal{T}_B$ et $\mathcal{R}_B$ sont les coefficients de transmission et de réflexion pour une barrière simple. Le coefficient de transmission global est finalement

$$\begin{aligned}\mathcal{T}_{\text{D.B.}} &= |(T_{\text{D.B.}})_{11}|^{-2} \\ &= \left\{1 + \left(\frac{4\mathcal{R}_B}{\mathcal{T}_B^2}\right)\cos^2(\theta + kl)\right\}^{-1}\end{aligned} \tag{3.18}$$

La caractéristique frappante de cette formule est la possibilité de résonances en fonction de l: l'argument θ de T_{11} ne dépend pas de l et donc en variant l on passe nécéssairement par des points où $\cos(\theta + kl) = 0$. Pour ces valeurs, l'onde traverse la double barrière avec probabilité 1. Notez que ceci est indépendant de la hauteur h et de la largeur a de la barrière. Cependant, comme $\mathcal{T}_B$ est très petit dans la limite où $ha \gg 1$, le coefficient $\mathcal{T}_{\text{D.B.}}$ tombe rapidement lorsqu'on s'éloigne de la résonance dans cette limite. Autrement dit, la largeur caractéristique de cette résonance tend vers zéro quand $\mathcal{T}_B$ devient petit. Un tel dispositif constituerait donc un excellent filtre en énergie pour les électrons. Remarquons cependant que θ est une fonction de k et qu'une analyse de $\mathcal{T}_{\text{D.B.}}$ en fonction de E pour une valeur donnée de l ne mène pas nécessairement à une résonance : tout dépend de l'existence ou non d'états quasi-liés dans le puits – et du nombre de ces états.

4 Oscillateur harmonique

4.1 États propres et opérateurs d'échelle

Le système le plus simple et le plus important dans toute la physique théorique est sans doute l'oscillateur harmonique. L'hamiltonien d'un oscillateur simple est

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \tag{4.1}$$

où m est la masse de l'oscillateur et ω sa fréquence. Rappelons ici comment on détermine le spectre de l'hamiltonien à l'aide des opérateurs d'échelle (voir la section 1.3): on définit l'opérateur

$$a \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(X + iP/m\omega) \tag{4.2}$$

En tenant compte de la relation $[X, P] = i\hbar$, on vérifie aisément que

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega(a^\dagger a + aa^\dagger) \quad \text{et} \quad [a, a^\dagger] = 1 \tag{4.3}$$

La relation de commutation nous permet d'écrire

$$H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2}) \qquad N \equiv a^\dagger a \tag{4.4}$$

Les opérateurs a et $a^\dagger$, qui ne sont pas hermitiques, ont la propriété de diminuer et d'augmenter respectivement la valeur propre de N, donc aussi de H. Pour cette raison, a et $a^\dagger$ sont appelés

opérateurs d'échelle. Soyons explicites : soit $|n\rangle$ un vecteur propre de N avec valeur propre n. Alors $a^\dagger|n\rangle$ est encore un vecteur propre de N, cette fois avec valeur propre $n+1$, car

$$\begin{aligned} Na^\dagger|n\rangle &= a^\dagger a a^\dagger|n\rangle \\ &= a^\dagger(1+a^\dagger a)|n\rangle \\ &= (1+n)a^\dagger|n\rangle \\ &\propto |n+1\rangle \end{aligned} \tag{4.5}$$

De même, l'état $a|n\rangle$ correspond à la valeur propre $n-1$:

$$\begin{aligned} Na|n\rangle &= a^\dagger a a|n\rangle \\ &= (-1+aa^\dagger)a|n\rangle \\ &= (-1+n)a|n\rangle \\ &\propto |n-1\rangle \end{aligned} \tag{4.6}$$

Ces propriétés se réflètent dans les relations de commutation

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger \qquad [N, a] = -a$$

En général, si le commutateur de deux opérateurs A et B est $[A, B] = \beta B$, cela signifie que l'opérateur B, agissant sur un état propre de A avec valeur propre α, produit un autre état propre de A avec valeur propre $\alpha + \beta$.

En supposant que l'état $|n\rangle$ est normalisé, on peut en déduire la norme de $a^\dagger|n\rangle$:

$$\langle n|aa^\dagger|n\rangle = \langle n|(1+a^\dagger a)|n\rangle = (n+1)\langle n|n\rangle \tag{4.7}$$

Il s'ensuit que

$$\begin{aligned} a^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\ a|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle \qquad (n \neq 0) \end{aligned} \tag{4.8}$$

On déduit de cette dernière relation que n doit être un entier positif ou nul. En effet, l'ensemble des valeurs propres de N forme une suite de valeurs espacées de 1:

$$\ldots n+2\ ,\ n+1\ ,\ n\ ,\ n-1\ ,\ n-2\ldots \tag{4.9}$$

et à chacune de ces valeurs propres ne correspond qu'un seul état propre (aucune dégénérescence). Si n n'était pas un entier, il s'ensuivrait une suite infinie d'états de norme *négative* avec $n < 0$, ce qui est impossible : on a supposé dès le départ que le produit bilinéaire est défini positif sur l'espace des états. Si n est entier, cette suite se termine avec $n = 0$ en raison de la relation $a|0\rangle = 0$. L'état $|0\rangle$ est donc l'état fondamental de l'hamiltonien : $H|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle$. Les états excités s'obtiennent alors simplement en appliquant $a^\dagger$ à répétition :

$$H|n\rangle = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega|n\rangle \qquad |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle \tag{4.10}$$

Remarques :

- Un opérateur de la forme $a^\dagger a$, où a est un opérateur quelconque, n'a que des valeurs propres positives ou nulles. En effet, il suffit de montrer que la valeur moyenne de $a^\dagger a$ dans n'importe quel état $|\psi\rangle$ est non négative :
$$\langle\psi|a^\dagger a|\psi\rangle = \langle a\psi|a\psi\rangle \tag{4.11}$$
Cette dernière quantité étant la norme d'un vecteur d'état, est positive, ou nulle si $a|\psi\rangle = 0$.
- Comme $[H, a] = -\hbar\omega a$, l'évolution temporelle de a est donnée par
$$\dot{a} = \frac{i}{\hbar}[H, a] = -i\omega a \quad \Longrightarrow \quad a(t) = a(0)\mathrm{e}^{-i\omega t} \tag{4.12}$$
Ce qui coïncide avec la version classique du problème.
- La fonction d'onde de l'état $|n\rangle$ se trouve aisément en appliquant l'opérateur différentiel
$$a^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(-\frac{1}{m\omega}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + x\right) \tag{4.13}$$
sur la fonction d'onde de l'état fondamental $\psi_0(x) = \langle x|0\rangle$. Cette dernière satisfait à l'équation
$$\left(\frac{1}{m\omega}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + x\right)\psi_0(x) = 0 \tag{4.14}$$
Ce qui implique
$$\psi_0(x) \propto \exp -\frac{1}{2}m\omega x^2/\hbar \tag{4.15}$$

4.2 États cohérents

Les états propres $|n\rangle$ de l'hamiltonien ne sont pas très utiles pour faire le lien avec la théorie classique de l'oscillateur harmonique. À cette fin on introduit une famille d'états appelés *états cohérents*, caractérisée par un paramètre complexe z:

$$|z\rangle \equiv \mathrm{e}^{-|z|^2/2}\mathrm{e}^{za^\dagger}|0\rangle \tag{4.16}$$

La constante $\mathrm{e}^{-|z|^2/2}$ assure la normalisation $\langle z|z\rangle = 1$, comme nous le vérifierons plus bas. L'état $|z\rangle$ est une superposition de tous les états propres $|n\rangle$, comme on peut le constater en développant l'exponentielle en série et en substituant la définition de $|n\rangle$:

$$|z\rangle = \mathrm{e}^{-|z|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \tag{4.17}$$

L'essentiel des propriétés des états cohérents peut être démontré à l'aide de la relation suivante :

$$[a, \mathrm{e}^{za^\dagger}] = z\mathrm{e}^{za^\dagger} \tag{4.18}$$

Pour démontrer cette relation, on doit d'abord montrer que $[a,(a^\dagger)^n] = n(a^\dagger)^{n-1}$, ce qui se fait aisément par récurrence, c'est-à-dire en supposant que la relation est vraie pour $n-1$:

$$\begin{aligned}
[a,(a^\dagger)^n] &= aa^\dagger(a^\dagger)^{n-1} - a^\dagger(a^\dagger)^{n-1}a \\
&= a^\dagger[a,(a^\dagger)^{n-1}] + (a^\dagger)^{n-1} \\
&= a^\dagger(n-1)(a^\dagger)^{n-2} + (a^\dagger)^{n-1} \\
&= n(a^\dagger)^{n-1}
\end{aligned} \tag{4.19}$$

Il faut aussi constater que le résultat est vrai pour $n=1$, ce qui est ici évident. Ensuite, on procède à un développement de Taylor :

$$\begin{aligned}
[a,\mathrm{e}^{za^\dagger}] &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{n!}[a,(a^\dagger)^n] \\
&= \sum_{n=1}^{\infty}\frac{z^n}{(n-1)!}(a^\dagger)^{n-1} \\
&= z\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{n!}(a^\dagger)^n \\
&= z\mathrm{e}^{za^\dagger}
\end{aligned} \tag{4.20}$$

Dans la dernière équation nous avons fait la substitution $n \to n+1$. La relation (4.18) est donc démontrée.

Cette relation nous permet d'affirmer que $|z\rangle$ est un état propre de a avec valeur propre z:

$$\begin{aligned}
a|z\rangle &= \mathrm{e}^{-|z|^2/2}a\mathrm{e}^{za^\dagger}|0\rangle \\
&= \mathrm{e}^{-|z|^2/2}[a,\mathrm{e}^{za^\dagger}]|0\rangle \qquad (a|0\rangle = 0) \\
&= z\mathrm{e}^{-|z|^2/2}\mathrm{e}^{za^\dagger}|0\rangle \\
&= z|z\rangle
\end{aligned} \tag{4.21}$$

Il s'ensuit que $a^m|z\rangle = z^m|z\rangle$ ou, plus généralement, $f(a)|z\rangle = f(z)|z\rangle$, où f est une fonction analytique quelconque. Ceci nous permet de confirmer la normalisation de $|z\rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle z|z\rangle &= \mathrm{e}^{-|z|^2/2}\langle 0|\mathrm{e}^{z^*a}|z\rangle \\
&= \mathrm{e}^{|z|^2/2}\langle 0|z\rangle \\
&= \langle 0|\mathrm{e}^{za^\dagger}|0\rangle \\
&= \langle 0|\left(|0\rangle + z|1\rangle + \frac{z^2}{\sqrt{2}}|2\rangle + \cdots\right) \\
&= 1
\end{aligned} \tag{4.22}$$

Nous pouvons aussi facilement démontrer que

$$\begin{aligned}
\langle w|z\rangle &= \exp - \left(|z|^2 + |w|^2 - 2w^*z\right)/2 \\
&= \exp -\frac{1}{2}|z-w|^2 \ \exp\frac{1}{2}(w^*z - wz^*)
\end{aligned} \tag{4.23}$$

où $(w^*z - wz^*)$ est purement imaginaire. Le recouvrement des états cohérents diminue donc rapidement avec la distance $|z - w|$.

On peut aussi définir l'opérateur unitaire suivant :

$$D(z) \equiv \exp(-z^*a + za^\dagger) \tag{4.24}$$

En utilisant la relation de Campbell-Baker-Hausdorff

$$\mathrm{e}^{A+B} = \mathrm{e}^A \mathrm{e}^B \mathrm{e}^{-[A,B]/2} \tag{4.25}$$

où par hypothèse $[A, B]$ commute avec A et B, on démontre que

$$D(z) = \mathrm{e}^{-z^*a} \mathrm{e}^{za^\dagger} \mathrm{e}^{|z|^2/2} \tag{4.26}$$

Ceci nous permet d'écrire la définition d'un état cohérent normalisé comme $|z\rangle = D(z)|0\rangle$.

On démontre aussi la relation de complétude suivante :

$$\frac{1}{\pi} \int \mathrm{d}z\mathrm{d}z^* \ |z\rangle\langle z| = 1 \tag{4.27}$$

où $\int \mathrm{d}z\mathrm{d}z^*$ signifie simplement une intégrale sur tout le plan complexe. Pour démontrer cette relation, on en prend simplement l'élément de matrice entre les états propres $|n\rangle$ et $|m\rangle$: Remarquons d'abord que

$$\langle n|z\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \mathrm{e}^{-|z|^2/2} \langle 0|a^n \mathrm{e}^{za^\dagger}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \mathrm{e}^{-|z|^2/2} z^n \tag{4.28}$$

Après quoi on calcule que

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} \int \mathrm{d}z\mathrm{d}z^* \ \langle n|z\rangle\langle z|m\rangle &= \frac{1}{\pi\sqrt{n!m!}} \int \mathrm{d}z\mathrm{d}z^* \ \mathrm{e}^{-|z|^2} z^n z^{*m} \\ &= \frac{1}{\pi\sqrt{n!m!}} \int r\mathrm{d}r\mathrm{d}\varphi \ \mathrm{e}^{-r^2} r^{n+m} \mathrm{e}^{i(n-m)\varphi} \\ &= \delta_{nm} \frac{1}{n!} \int \mathrm{d}r^2 \ r^{2n} \mathrm{e}^{-r^2} \\ &= \delta_{mn} \end{aligned} \tag{4.29}$$

Ce qui est évidemment le résultat cherché.

Étudions maintenant les valeurs moyennes et les fluctuations de X et de P dans l'état cohérent $|z\rangle$. Rappelons que

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger) \qquad P = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a - a^\dagger)/i \tag{4.30}$$

Comme $\langle z|a|z\rangle = z$, $\langle z|a^\dagger|z\rangle = z^*$, $\langle z|a^\dagger a|z\rangle = |z|^2$ et $\langle z|aa^\dagger|z\rangle = |z|^2 + 1$, on en déduit que

$$\begin{aligned} \langle z|X|z\rangle &= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \mathrm{Re}\ z & \langle z|X^2|z\rangle &= \frac{2\hbar}{m\omega}((\mathrm{Re}\ z)^2 + \frac{1}{4}) \\ \langle z|P|z\rangle &= \sqrt{2\hbar m\omega} \mathrm{Im}\ z & \langle z|P^2|z\rangle &= 2\hbar m\omega((\mathrm{Im}\ z)^2 + \frac{1}{4}) \end{aligned} \tag{4.31}$$

Ces relations nous permettent de calculer les fluctuations :

$$\begin{aligned}(\Delta X)^2 &\equiv \langle z|X^2|z\rangle - (\langle z|X|z\rangle)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \\ (\Delta P)^2 &= \frac{\hbar m\omega}{2}\end{aligned} \tag{4.32}$$

On note que la relation d'incertitude est tout juste satisfaite :

$$(\Delta X)(\Delta P) = \frac{1}{2}\hbar \quad (\text{dans } |z\rangle) \tag{4.33}$$

Pour fins de comparaison, notons que dans l'état propre $|n\rangle$ la relation d'incertitude devient

$$(\Delta X)(\Delta P) = (2n+1)\frac{1}{2}\hbar \quad (\text{dans } |n\rangle) \tag{4.34}$$

Donc les états cohérents minimisent l'incertitude quantique. Dans ce sens, ce sont les états qui se rapprochent le plus des trajectoires classiques et on les nomme aussi *états quasi-classiques*.

Pour s'en convaincre un peu plus, calculons leur évolution temporelle du point de vue de Schrödinger : étant donné que

$$|n(t)\rangle = |n\rangle \exp -i(n+\frac{1}{2})\omega t \tag{4.35}$$

on déduit de (4.17) que

$$\begin{aligned}|z(t)\rangle &= \mathrm{e}^{-|z|^2/2}\mathrm{e}^{-i\omega t/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{n!}}\mathrm{e}^{-in\omega t}|n\rangle \\ &= \mathrm{e}^{-i\omega t/2}|\mathrm{e}^{-i\omega t}z(0)\rangle\end{aligned} \tag{4.36}$$

Le paramètre z effectue donc un mouvement circulaire dans le plan complexe, avec une fréquence ω et une amplitude $|z|$ constante. Comme $\langle X\rangle \propto \mathrm{Re}\ z$ et $\langle P\rangle \propto \mathrm{Im}\ z$, on voit que ces oscillations correspondent bel et bien aux oscillations classiques, sauf que les valeurs de X et P ne sont pas précisément déterminées.

Le fait que le module $|z|$ ne change pas avec le temps provient de ce que $|z|^2$ est égal à la valeur moyenne de $N = a^\dagger a$:

$$\langle z|N|z\rangle = \langle z|a^\dagger a|z\rangle = |z|^2 \tag{4.37}$$

Puisque N commute avec l'hamiltonien, il s'ensuit que $\langle N\rangle$ est constant. On associe donc $\langle N\rangle$ à l'amplitude de l'oscillation de z. La limite classique est obtenue quand la valeur moyenne $|\langle X\rangle|$ est grande (la plupart du temps) en comparaison de l'incertitude ΔX. Dans cette limite la valeur moyenne de N est donc $\gg 1$.

Problème 4.1 *Opérateurs hermitiques*

a) Montrez que les valeurs propres d'un opérateur hermitique A sont réelles et que les vecteurs propres associés à des valeurs propres distinctes sont orthogonaux.

b) Montrez que si deux opérateurs hermitiques A et B commutent, alors A et B sont simultanément diagonalisables, c'est-à-dire qu'il existe une base orthogonale de vecteurs propres communs à A et B.

c) Montrez que si deux opérateurs anticommutent ($AB + BA = 0$) alors ces deux opérateurs ne peuvent pas être diagonalisés simultanément.

d) Montrez que deux opérateurs conjugués Q et P, (c.-à-d. tels que $[Q, P] = i\hbar$) ne peuvent pas être représentés par des matrices de dimension finie.

Problème 4.2 *Valeurs moyennes*

a) Démontrez que la valeur moyenne d'une observable quelconque A est constante dans un état stationnaire.

b) Démontrez que la valeur moyenne d'une observable A qui commute avec H est constante dans n'importe lequel état $|\psi\rangle$, stationnaire ou non.

c) Démontrez que les équations du mouvement pour la position x et l'impulsion p dans l'oscillateur harmonique classique se retrouvent en mécanique quantique au niveau des valeurs moyennes $\langle X\rangle$ et $\langle P\rangle$. Il s'agit d'un résultat tout-à-fait général : les valeurs moyennes des opérateurs dans un état quantique quelconque ont les mêmes équations du mouvement que les variables classiques correspondantes.

Problème 4.3 *Relation de Hausdorff*

a) A et B étant deux opérateurs quelconques, démontrez la relation de Hausdorff :

$$\boxed{\mathrm{e}^{-A}B\mathrm{e}^{A} = B + [B, A] + \frac{1}{2!}[[B, A], A] + \frac{1}{3!}[[[B, A], A], A] + \cdots}$$

Indice : remplacez A par tA et effectuez un développement de Taylor en t.

b) Si $[B, A] = cB$, où c est une constante, montrez que

$$\mathrm{e}^{-A}B\mathrm{e}^{A} = \mathrm{e}^{c}B$$

D'autre part, si $[[B, A], A] = c^2B$, montrez que

$$\mathrm{e}^{-A}B\mathrm{e}^{A} = B\cosh(c) + [B, A]\frac{\sinh(c)}{c}$$

c) Utilisez la relation de Hausdorff pour montrer que l'opérateur unitaire

$$T(\mathbf{a}) = \exp -i\mathbf{P}\cdot\mathbf{a}/\hbar$$

effectue une translation lorsqu'appliqué à la coordonnée $\mathbf{X}$.

Problème 4.4 *Relation de Campbell-Baker-Hausdorff*

L'objet de cet exercice est de démontrer la formule de Campbell-Baker-Hausdorff :

$$\boxed{\mathrm{e}^{A+B} = \mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{B}\mathrm{e}^{-[A,B]/2}}$$

où le commutateur $c = [A, B]$ est un nombre, c'est-à-dire commute avec A et B. Pour ce faire, nous allons étudier la fonction $f(t) \equiv \mathrm{e}^{A+tB}$ et la développer en série de puissances de t:

$$\mathrm{e}^{A+B} = f(1) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}f^{(n)}(0)$$

où $f^{(n)}$ est la n^e dérivée de f.

a) Montrez que $[B, A^n] = -ncA^{n-1}$.

b) Montrez que

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(A+tB)^n = -\frac{1}{2}n(n-1)c(A+tB)^{n-2} + n(A+tB)^{n-1}B$$

c) Montrez que

$$\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}t^n}\mathrm{e}^{A+tB} = \mathrm{e}^{A+tB}(B-c/2)^n$$

d) Démontrez enfin la formule de Campbell-Baker-Hausdorff à l'aide du développement de Taylor ci-haut.

Problème 4.5 *L'oscillateur harmonique*

a) Démontrez que l'évolution temporelle de l'opérateur position d'un oscillateur harmonique est

$$X(t) = X(0)\cos\omega t + \frac{P(0)}{m\omega}\sin\omega t$$

Pour ce faire, utilisez la définition de l'évolution temporelle dans la représentation de Heisenberg

$$X(t) = \mathrm{e}^{iHt/\hbar}X(0)\mathrm{e}^{-iHt/\hbar}$$

et appliquez la formule de Hausdorff ci-haut.

b) On définit la *fonction de Green* $G(t)$ de l'oscillateur harmonique comme

$$G(t) = \langle 0|\mathcal{T}X(t)X(0)|0\rangle$$

où $\mathcal{T}$ symbolise le produit chronologique, qui place les facteurs qui suivent dans l'ordre des temps les plus récents aux plus anciens, de gauche à droite. Ainsi, $\mathcal{T}X(t)X(0) = \theta(t)X(t)X(0) + \theta(-t)X(0)X(t)$, où $\theta(t)$ est la fonction de Heaviside. Calculez $G(t)$.

Problème 4.6 *Deux oscillateurs harmoniques couplés*

L'hamiltonien suivant représente deux oscillateurs harmoniques de même fréquences, couplés linéairement, en dimension 1:

$$H = \frac{1}{2m}(P_1^2 + P_2^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(X_1^2 + X_2^2) + m\gamma^2 X_1 X_2$$

On a évidemment les relations

$$[X_j, P_k] = i\hbar\delta_{jk}$$

a) Trouvez les valeurs propres et vecteurs propres de H.

b) Ce modèle n'a plus de solution si $\gamma > \omega$. Donnez une raison physique de cette pathologie.

Problème 4.7 *États cohérents*

a) Démontrez que l'opérateur d'échelle $a^\dagger$ ne possède pas d'état propre, contrairement à a. Indice : donnez une preuve par l'absurde en développant l'état propre supposé dans la base des états stationnaires.

b) Montrez que l'action de $a^\dagger$ sur un état cohérent est

$$a^\dagger|z\rangle = \mathrm{e}^{-|z|^2/2}\frac{\partial}{\partial z}\left\{\mathrm{e}^{|z|^2/2}|z\rangle\right\}$$

si l'état $|z\rangle$ est normalisé.

c) Montrez que l'opérateur unitaire $D(z) = \mathrm{e}^{-z^*a+za^\dagger}$ se multiplie de la manière suivante :

$$D(z)D(w) = D(z+w)\mathrm{e}^{(w^*z-wz^*)/2}$$

d) Quel genre d'état obtient-on en appliquant sur le fondamental de l'oscillateur harmonique l'opérateur de translation d'une distance b

$$T(b) = \exp -\frac{i}{\hbar} bP$$

où P est l'opérateur d'impulsion?

e) En supposant que z est réel positif à $t = 0$ – ce qui équivaut à un choix particulier de l'origine des temps – montrez que la fonction d'onde $\psi_z(x,t)$ dans le schéma de Schrödinger est

$$\psi_z(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \mathrm{e}^{-i\omega t/2} \exp - \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - |z|\cos\omega t\right)^2 \exp\left(-2i|z|\sin\omega t\left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \frac{|z|}{2}\cos\omega t\right]\right)$$

Indice : utilisez l'opérateur unitaire $D(z)$ et son évolution temporelle, ainsi que la relation de Campbell-Baker-Hausdorff.

Problème 4.8 *Phase et états cohérents*

On définit l'opérateur de phase Θ d'un oscillateur harmonique de la façon suivante :

$$a = \mathrm{e}^{-i\Theta}\sqrt{N} \qquad N = a^\dagger a$$

a) Justifiez cette définition en montrant que l'évolution temporelle de la phase est $\Theta(t) = \Theta(0) + \omega t$, où ω est la fréquence de l'oscillateur; utilisez pour cela les équations du mouvement pour a et N. Du même coup, montrez que Θ et N sont des opérateurs conjugués, au même titre que la position et le nombre d'onde.

b) Les états cohérents de l'oscillateur harmonique ne sont pas des états propres de l'opérateur $N = a^\dagger a$: ils ne contiennent pas un nombre déterminé de quantas. Montrez cependant que l'état

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta\ \mathrm{e}^{-in\theta}|z\rangle \qquad\qquad (z = r\mathrm{e}^{i\theta})$$

est un état propre de N avec valeur propre n. Peut-on dire que l'état cohérent est un état propre de la phase Θ ?

Problème 4.9 *Niveaux de Landau*

Considérez une particule de charge e et de masse m placée dans un champ magnétique uniforme $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$ et confinée sur le plan xy (aucun mouvement dans la direction z). L'hamiltonien prend la forme suivante :

$$H = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{P} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2$$

Nous adopterons une jauge dans laquelle le potentiel vecteur est $\mathbf{A} = -xB\hat{\mathbf{y}}$.

a) Montrez que cet hamiltonien se réduit à celui d'un oscillateur harmonique de fréquence $\omega_c \equiv eB/mc$.

b) Quelles sont les composantes de $\mathbf{P}$ qui sont de 'bons nombres quantiques' (c.-à-d. qui sont conservées)? Comment peut-on spécifier un état propre de H (c.-à-d. avec quels nombres quantiques)? Ces états sont-ils dégénérés?

c) Ajoutons maintenant un champ électrique uniforme $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{x}}$, correspondant à un terme supplémentaire $V = -eEx$ dans l'hamiltonien. Montrez que les niveaux d'énergie sont maintenant

$$E = n\hbar\omega_c + \frac{Ec}{B}p_y + \text{const.}$$

où p_y est la composante en y de l'impulsion de cet état et n est un entier non négatif.

CHAPITRE 2

Théorie de la symétrie

Les symétries jouent un rôle extrêmement important en physique théorique. Non seulement facilitent-elles beaucoup la solution de nombreux problèmes, mais elles sont aussi à la base des théories des interactions fondamentales. Ce chapitre constitue une introduction aux concepts de base de la théorie des groupes et à ses applications à la mécanique quantique.

1 Opérations de symétrie

1.1 Symétries et transformations unitaires

Par opération de symétrie on entend toute transformation d'une quantité qui ne change pas certaines de ses propriétés. Par exemple, la rotation simultanée d'un ensemble de particules autour d'un axe n'affecte pas leur énergie d'interaction, tout comme la translation en bloc des mêmes particules. En mécanique classique, une opération de symétrie se traduit par une application de l'espace des configurations sur lui-même. Par exemple, une translation de la coordonnée x peut s'écrire $x \to x + a$, où a est une constante. En mécanique quantique, la même transformation peut être appliquée aux opérateurs observables : $X \to X + a$.

En général, une observable A peut subir une opération de symétrie $A \to f(A)$. Pour mériter ce nom, la transformation ne doit pas changer les propriétés de l'observable A, en particulier son spectre de valeurs propres. Pour cette raison, la transformation doit pouvoir être exprimée comme une transformation de similitude :

$$f(A) = U_f^{-1} A U_f \tag{1.1}$$

où U est un opérateur (linéaire pour le moment). En effet, l'équation caractéristique déterminant les valeurs propres de A est alors formellement la même pour $f(A)$:

$$\begin{aligned} \det(f(A) - \lambda) &= \det[U^{-1}(A - \lambda)U] \\ &= \det(A - \lambda) \\ &= 0 \end{aligned} \tag{1.2}$$

Étant donné un état $|\psi\rangle$, une telle transformation modifie bien sûr la valeur moyenne $\langle\psi|A|\psi\rangle$. On peut alors imaginer que l'opération de symétrie puisse être représentée de deux façons : soit par une transformation des observables, soit par une transformation des états, pourvu que l'effet soit le même sur les valeurs moyennes. L'opération de symétrie est alors représentée par l'opérateur U_f introduit plus haut : $|\psi\rangle \to U_f|\psi\rangle$. Cet opérateur doit être tel que

$$\langle\psi|f(A)|\psi\rangle = \langle U_f\psi|A|U_f\psi\rangle = \langle\psi|U_f^\dagger A U_f|\psi\rangle \tag{1.3}$$

Comme cette relation est vraie pour tous les états, on peut écrire

$$\boxed{f(A) = U_f^\dagger A U_f} \tag{1.4}$$

c'est-à-dire que l'opérateur U_f doit être unitaire. Rappelons qu'un opérateur U est dit *unitaire* si son adjoint est égal à son inverse : $U^{-1} = U^\dagger$. En d'autres termes, un opérateur unitaire laisse invariant les produits bilinéaires :

$$\langle U\psi_1|U\psi_2\rangle = \langle \psi_1|U^\dagger U\psi_2\rangle = \langle \psi_1|\psi_2\rangle \tag{1.5}$$

D'un autre côté, un opérateur qui laisse invariant le produit bilinéaire de toutes les paires de vecteurs possibles est forcément unitaire. Notons que le produit de deux opérateurs unitaires est aussi unitaire.

Notons que si A est hermitique, alors l'exponentielle $U = \mathrm{e}^{iA}$ est un opérateur unitaire, car

$$U^\dagger = \exp -iA^\dagger = \exp -iA = U^{-1} \tag{1.6}$$

Les valeurs propres de U sont alors de la forme e^{ia}, où a est réel.

Théorème de Wigner et transformations antiunitaires
Signalons que les relations d'orthogonalité entre états et les valeurs moyennes des observables sont aussi préservées par les transformations dites *antiunitaires* $|\psi\rangle \to K|\psi\rangle$ qui, par définition, possèdent les propriétés suivantes :

- K est antilinéaire.
- $\langle K\psi|K\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*$.

Rappelons qu'un opérateur K est qualifié d'*antilinéaire* si

- $K(|\phi\rangle + |\psi\rangle) = K|\phi\rangle + K|\psi\rangle$.
- $K(c|\psi\rangle) = c^* K|\psi\rangle$.

Le théorème de Wigner stipule que les seules transformations pouvant représenter les opérations de symétrie sont unitaires ou antiunitaires. Signalons qu'une transformation antiunitaire n'est pas pleinement linéaire, mais que le produit de deux opérations antiunitaires est unitaire. En physique, la seule symétrie représentée par un opérateur antiunitaire est l'*inversion du temps*.

Les transformations de symétrie forment généralement des ensembles : ensemble des translations, des rotations, etc. Ces ensembles forment ce qu'on appelle des *groupes*, étant donné que la succession de deux opérations de symétries est en elle-même une opération de symétrie. Nous ferons un survol rapide de la théorie des groupes plus bas.

Transformations d'espace
Beaucoup d'opérations de symétrie sont effectuées sur les coordonnées (translations, rotations, inversions). Soit U l'opérateur effectuant une telle transformation dans l'espace des états et $\mathcal{U}$ la transformation correspondante de la position $\mathbf{r}$. Par exemple, lors d'une translation d'un vecteur $\mathbf{a}$, on a $\mathcal{U}(\mathbf{r}) = \mathbf{r} + \mathbf{a}$. D'après ce qui a été dit plus haut, on a

$$\mathcal{U}(\mathbf{R}) = U^\dagger \mathbf{R} U \tag{1.7}$$

L'effet d'une telle transformation sur les états propres de la position est

$$|\mathbf{r}\rangle \to U|\mathbf{r}\rangle = |\mathcal{U}(\mathbf{r})\rangle \tag{1.8}$$

où $\mathcal{U}(\mathbf{r})$ est la nouvelle position, obtenue après transformation. Sur un état $|\psi\rangle$, cette transformation a l'effet suivant : $|\psi\rangle \to U|\psi\rangle$. L'effet sur la fonction d'onde $\psi(\mathbf{r})$ est alors

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|\psi\rangle &\to \langle \mathbf{r}|U|\psi\rangle \\ &= \langle U^\dagger \mathbf{r}|\psi\rangle = \langle \mathcal{U}^{-1}(\mathbf{r})|\psi\rangle \\ &= \psi(\mathcal{U}^{-1}(\mathbf{r}))\end{aligned} \tag{1.9}$$

En conclusion, la transformation agit de façon inverse sur la fonction d'onde, en comparaison de son action sur l'état propre de la position $|\mathbf{r}\rangle$.

1.2 Translations et représentation en impulsion

Comme premier exemple d'opération de symétrie, étudions les translations. On définit une translation par la transformation $x \to x+a$ sur la coordonnée x. Restreignons-nous pour le moment au cas unidimensionnel; nous verrons plus bas comment généraliser nos résultats. Sur l'opérateur de position X cette opération doit être effectuée par un opérateur unitaire $T(a)$:

$$T(a)^\dagger X T(a) = X + a \tag{1.10}$$

Cette relation peut aussi s'écrire

$$[X, T(a)] = aT(a) \tag{1.11}$$

Cette forme nous permet de déduire l'action de $T(a)$ sur $|x\rangle$:

$$T(a)|x\rangle = |x+a\rangle \quad \text{et} \quad T(a)^\dagger|x\rangle = |x-a\rangle \tag{1.12}$$

En effet, $T(a)$ agit comme un opérateur d'échelle sur la position x, c'est-à-dire que $T(a)|x\rangle$ est un vecteur propre de X avec valeur propre $x+a$:

$$\begin{aligned}XT(a)|x\rangle &= T(a)X|x\rangle + aT(a)|x\rangle \\ &= (x+a)T(a)|x\rangle\end{aligned} \tag{1.13}$$

Étant donné que $T(a)$ est unitaire, il préserve la norme et on en déduit que $T(a)|x\rangle = |x+a\rangle$ (un choix de phase a été fait ici). L'effet de la translation sur la fonction d'onde $\psi(x)$ est différent :

$$\langle x|T(a)|\psi\rangle = \langle T(a)^\dagger x|\psi\rangle = \langle x-a|\psi\rangle = \psi(x-a) \tag{1.14}$$

Bien sûr, tout ceci découle directement de (1.8) et (1.9).

Une translation sur une distance a, suivie d'une translation sur une distance b, est bien entendu équivalente à une translation sur une distance $a+b$. On a donc la relation

$$T(b)T(a) = T(a+b) \tag{1.15}$$

De ceci on déduit que les différentes translations commutent : $[T(a), T(b)] = 0$. Chaque translation étant associée à un déplacement a, l'ensemble des translations est isomorphe à l'ensemble des réels $\mathbb{R}$, dans lequel la loi d'addition représente la composition des translations.

Étudions maintenant le cas d'une translation infinitésimale, c'est-à-dire une opération très proche de l'identité. On peut écrire l'opérateur correspondant comme $T(\delta a) \sim 1 - i\delta a K$, où δa est infinitésimal (nous n'allons conserver que les termes au premier ordre en δa) et K est un opérateur qu'on appelle le *générateur* des translations. $T(\delta a)$ étant unitaire, il s'ensuit que le générateur doit

être hermitique. La relation de commutation $[X, T(a)] = aT(a)$ devient, au premier ordre en δa: $[X, K] = i$. Donc nous devons identifier K à l'opérateur d'impulsion; plus précisément : $K = P/\hbar$.

D'autre part, une translation finie sur une distance a peut toujours être considérée comme une succession de N translations infinitésimales δa, telles que $a = N\delta a$:

$$\begin{aligned} T(a) &= T(a/N)^N \\ &= \lim_{N\to\infty}(1 - i(a/N)K)^N \\ &= \exp -iaK \end{aligned} \tag{1.16}$$

Nous avons donc la représentation suivante pour l'opérateur de translation en fonction de l'opérateur d'impulsion :

$$\boxed{T(a) = \exp -\frac{i}{\hbar}aP} \tag{1.17}$$

Étant donné la relation $T^\dagger(a)XT(a) = X + a$, toute fonction $f(X)$ de la coordonnée se transforme comme suit lors d'une translation :

$$T^\dagger(a)f(X)T(a) = f(X + a) \tag{1.18}$$

Si l'hamiltonien H ne dépend pas de la coordonnée x, alors il est invariant par rapport aux translations, c'est-à-dire qu'il commute avec l'opérateur d'impulsion P. Il est alors possible de choisir des états propres de H qui soient aussi états propres de P: $H|p\rangle = E(p)|p\rangle$. La fonction d'onde $\psi_p(x) = \langle x|p\rangle$ d'un état propre $|p\rangle$ de l'impulsion se calcule facilement, en effectuant une translation :

$$\psi_p(x - a) = \langle x|T(a)|p\rangle = \mathrm{e}^{-ipa/\hbar}\langle x|p\rangle = \mathrm{e}^{-ipa/\hbar}\psi_p(x) \tag{1.19}$$

Ceci étant valide pour toute valeur de x ou de a, on peut fixer $x = 0$ et ensuite changer a en $-x$ pour obtenir

$$\psi_p(x) = C\mathrm{e}^{ipx/\hbar} \tag{1.20}$$

La normalisation pose ici le même problème que pour la représentation en coordonnées. Nous adopterons la normalisation $C = 1$ dans ce cours, ce qui a les conséquences suivantes :

$$\langle p|p'\rangle = \int \mathrm{d}x\langle p|x\rangle\langle x|p'\rangle = \int \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{i(p'-p)x/\hbar} \tag{1.21}$$

En sachant que

$$\int \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{ikx} = 2\pi\delta(k) \tag{1.22}$$

On en déduit que

$$\langle p|p'\rangle = 2\pi\hbar\delta(p - p') \quad \text{et} \quad \int \frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\ |p\rangle\langle p| = 1 \tag{1.23}$$

Dans cette convention, la différentielle $\mathrm{d}p$ est toujours divisée par $2\pi\hbar$ et la fonction delta en impulsion est toujours multipliée par $2\pi\hbar$.

On utilise parfois la représentation en impulsion d'un état :

$$|\psi\rangle = \int (\mathrm{d}p)\ \tilde{\psi}(p)|p\rangle \qquad \begin{aligned} \tilde{\psi}(p) &\equiv \langle p|\psi\rangle \\ (\mathrm{d}p) &\equiv \frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar} \end{aligned} \tag{1.24}$$

Notons que $\tilde{\psi}(p)$ est la transformée de Fourier de la fonction d'onde $\psi(x)$:

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}(p) &= \langle p|\psi\rangle \\ &= \int \mathrm{d}x\ \langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle \\ &= \int \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{-ipx/\hbar}\psi(x)\end{aligned} \tag{1.25}$$

Cependant on utilisera plus souvent la représentation en nombre d'onde $k = p/\hbar$, qui a l'avantage de faire disparaître la constante de Planck des mesures d'intégration, fonctions delta et exponentielles.

Finalement, indiquons comment ces résultats sont modifiés en dimension 3. L'opérateur de translation par un vecteur $\mathbf{a}$ est

$$\boxed{T(\mathbf{a}) = \exp -i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}/\hbar} \tag{1.26}$$

Les opérateurs associés à des translations différentes commutent : $[T(\mathbf{a}), T(\mathbf{a}')] = 0$. La fonction d'onde d'un état propre de l'impulsion est $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \exp i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}$ ($\mathbf{p}$ est le vecteur d'onde) et la représentation en vecteur d'onde s'écrit

$$|\psi\rangle = \int (\mathrm{d}^3p)\ \tilde{\psi}(\mathbf{p})|\mathbf{p}\rangle \qquad \begin{aligned}\tilde{\psi}(\mathbf{p}) &\equiv \langle\mathbf{p}|\psi\rangle \\ (\mathrm{d}^3p) &\equiv \frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\end{aligned} \tag{1.27}$$

1.3 Évolution temporelle

Comme on étudie les translations dans l'espace, on peut aussi étudier les translations dans le temps : $t \to t + a$. Cependant, la temps t n'est pas une variable dynamique en mécanique quantique : il n'y a pas d''opérateur du temps'. On peut toutefois définir un opérateur unitaire $U(t)$, appelé *opérateur d'évolution*, qui effectue l'évolution temporelle du système sur un temps t. Par analogie avec les translations spatiales, l'état $|\psi(t)\rangle_S$ est alors obtenu de l'état $|\psi(0)\rangle_S$ par la relation $|\psi(t)\rangle_S = U(t)|\psi(0)\rangle_S$. Ceci s'applique évidemment dans le point de vue de Schrödinger. Dans le point de vue de Heisenberg, ce sont les opérateurs qui dépendent du temps; pour une observable A, on écrirait alors

$$A(t) = U(t)^\dagger A(0)U(t) \tag{1.28}$$

Les points de vue de Heisenberg et de Schrödinger sont donc reliés par une transformation unitaire :

$$|\psi(t)\rangle_S = U(t)|\psi\rangle \tag{1.29}$$

Montrons maintenant que l'opérateur d'évolution est donné par

$$\boxed{U(t) = \exp\frac{-iHt}{\hbar}} \tag{1.30}$$

où H est l'hamiltonien du système. Il suffit de remarquer que la condition initiale est satisfaite puisque $U(0) = 1$ et que l'équation (2.11) est reproduite :

$$\begin{aligned}A(t+\delta t) &\approx (1 + iH\delta t/\hbar)U(t)^\dagger A(0)U(t)(1 - iH\delta t/\hbar) \\ &\approx A(t) + \frac{i\delta t}{\hbar}[H, A(t)] + \mathcal{O}(\delta t^2)\end{aligned} \tag{1.31}$$

et donc

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}[H, A] \tag{1.32}$$

L'expression que nous avons donnée ici pour $U(t)$, ainsi que la démonstration qui s'ensuit, n'est valable que si l'hamiltonien H ne dépend pas explicitement du temps. Dans le cas contraire, les hamiltoniens appartenant à des instants différents ne commutent pas en général et la forme de l'opérateur d'évolution est différente. Cet opérateur dépend alors du temps initial t_i et du temps final t_f et non seulement de la différence $t_f - t_i$: on le note $U(t_f, t_i)$. Il possède bien sûr la propriété de composition

$$U(t_f, t_i) = U(t_f, \tau)U(\tau, t_i) \tag{1.33}$$

On peut l'écrire explicitement en découpant l'intervalle $t_f - t_i$ en tranches de temps infinitésimales $\delta t = (t_f - t_i)/N$ et en supposant que l'hamiltonien est constant à l'intérieur de chaque tranche de temps, ce qui devient exact dans la limite $N \to \infty$:

$$\begin{aligned} U(t_f, t_i) &= \lim_{N\to\infty} \prod_{n=0}^{N-1} \left(1 - \frac{i}{\hbar} H(t_i + n\delta t)\delta t\right) \\ &= \mathcal{T} \exp -\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t\ H(t) \end{aligned} \tag{1.34}$$

Dans la première équation, il est implicite que les facteurs sont placés dans l'ordre des temps croissants de droite à gauche. Dans la deuxième équation, le symbole $\mathcal{T}$ signifie un *produit chronologique* dont la signification exacte est en fait donnée par la première équation.

1.4 Parité

Les opérations de symétries que nous avons étudiées jusqu'ici dépendent de paramètres continus, comme le vecteur de translation $\mathbf{a}$ ou le temps t. Il existe des opérations de symétrie *discrètes*, qui sont en nombre fini. L'exemple le plus simple est la *parité*, c'est-à-dire l'opération qui inverse le signe de l'une des coordonnées, disons x. Cette opération est représentée par un opérateur unitaire Π. On a donc $\Pi^\dagger X \Pi = -X$. Comme on retombe sur X en appliquant cette opération deux fois de suite, on conclut que $\Pi^2 = 1$, ou encore $\Pi^\dagger = \Pi$:

$$\Pi X \Pi = -X \qquad\qquad \Pi^2 = 1 \tag{1.35}$$

Il est important que l'opération de parité ne puisse être assimilée à une rotation, c'est-à-dire ne puisse être obtenue par une suite continue de transformations infinitésimales à partir de l'identité. On peut cependant en modifier la définition par une rotation. Par exemple, en dimension 3, on peut définir la parité soit comme $(x, y, z) \to (-x, y, z)$, soit comme $(x, y, z) \to -(x, y, z)$. Ces deux opérations diffèrent par une rotation de π par rapport à l'axe des x. On peut donc redéfinir Π de façon à ce que $\Pi \mathbf{R} \Pi = -\mathbf{R}$. Cependant, en dimension 2, la transformation $(x, y) \to -(x, y)$ n'est qu'une simple rotation, alors que $(x, y) \to (-x, y)$ et $(x, y) \to (x, -y)$ sont des opérations de parité.

À partir de la relation $\Pi X \Pi = -X$ et de la relation de commutation $[X, P_x] = i\hbar$, on arrive à la conclusion que $\Pi P_x \Pi = -P_x$. Si on adopte la définition tridimensionnelle de la parité, ceci devient $\Pi \mathbf{P} \Pi = -\mathbf{P}$. Les opérateurs $\mathbf{R}$ et $\mathbf{P}$ sont des vecteurs *polaires*, c'est-à-dire qu'ils changent de signe par une opération de parité. Bien entendu, le produit vectoriel de deux vecteurs polaires ne change pas de signe par une opération de parité; un tel vecteur est qualifié d'*axial*. C'est le cas notamment du moment cinétique. On a donc $\Pi \mathbf{L} \Pi = \mathbf{L}$ ou encore $[\Pi, \mathbf{L}] = 0$, ce qui signifie que les états propres du moment cinétique ont une parité bien déterminée.

1.5 Systèmes composites

Considérons un ensemble de N particules, chacune avec son propre espace des états S_i. L'espace des états de l'ensemble est le produit tensoriel

$$S = S_1 \otimes S_2 \otimes \cdots \otimes S_N \quad . \tag{1.36}$$

Sur chaque espace S_i on définit comme ci-haut un opérateur de translation $T_i(\mathbf{a}) = \exp -\mathbf{a} \cdot \mathbf{P}_i/\hbar$. Sur l'espace produit S, l'opérateur de translation est simplement le produit tensoriel des opérateurs de translation associés à chacune des particules :

$$\begin{aligned} T(\mathbf{a}) &= T_1(\mathbf{a}) \otimes T_2(\mathbf{a}) \otimes \cdots \otimes T_N(\mathbf{a}) \\ &= \exp -\frac{i}{\hbar}\mathbf{a} \cdot (\mathbf{P}_1 + \cdots + \mathbf{P}_N) \end{aligned} \tag{1.37}$$

Il est bon ici de rappeler la définition du produit tensoriel d'opérateurs. Si A et B sont des opérateurs agissant dans S_1 et S_2 respectivement, on peut étendre les définitions de A et B à l'espace produit $S = S_1 \otimes S_2$ ainsi :

$$\begin{aligned} A(|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle) &= (A|\psi_1\rangle)|\psi_2\rangle \\ B(|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle) &= |\psi_1\rangle(B|\psi_2\rangle) \end{aligned} \tag{1.38}$$

et par linéarité sur les états de S qui sont des combinaisons linéaires de produits tensoriels d'états. C'est ainsi que l'action de T_i est définie sur S. Ce que l'Éq. (1.37) signifie, c'est que l'opérateur de symétrie agissant sur le produit tensoriel S est le produit tensoriel des opérateurs de symétrie associés aux différentes particules et que son générateur est la somme des générateurs individuels : un résultat tout-à-fait naturel. Même si ce résultat n'est exprimé ici que pour les translations, il est parfaitement général, car les générateurs associés à des particules différentes commutent entre eux, comme toute paire d'opérateurs définis sur des espaces différents.

2 Théorie du moment cinétique

2.1 Générateurs et moment cinétique

De même que l'opérateur d'impulsion $\mathbf{P}$ est le générateur des translations, l'opérateur du moment cinétique $\mathbf{J}$ est le générateur des rotations dans l'espace. On peut même considérer cet énoncé comme une définition du moment cinétique. Cependant, dans le but de faire le lien avec la définition habituelle du moment cinétique en mécanique, démontrons ce fait dans le cas du moment cinétique dit *orbital*.

On définit une rotation infinitésimale de l'espace par la transformation

$$\mathbf{r} \to \mathbf{r} + \delta\theta \mathbf{n} \wedge \mathbf{r} \quad \text{ou} \quad r_i \to r_i + \delta\theta \varepsilon_{ijk} n_j r_k \tag{2.1}$$

où $\mathbf{n}$ est la direction de l'axe de rotation et $\delta\theta$ est l'angle infinitésimal de rotation. L'opérateur unitaire $\mathcal{R}(\mathbf{n}, \delta\theta)$ qui représente cette rotation dans l'espace des états doit satisfaire à

$$\mathcal{R}^\dagger(\mathbf{n}, \delta\theta)\mathbf{R}\mathcal{R}(\mathbf{n}, \delta\theta) = \mathbf{R} + \delta\theta \mathbf{n} \wedge \mathbf{R} \tag{2.2}$$

au premier ordre en $\delta\theta$ ($\mathbf{R}$ est maintenant l'opérateur de position). Cela peut aussi s'écrire

$$[\mathcal{R}(\mathbf{n}, \delta\theta), R_i] = -\delta\theta \varepsilon_{ijk} \mathcal{R}(\mathbf{n}, \delta\theta) n_j R_k \tag{2.3}$$

Montrons que

$$\mathcal{R}(\mathbf{n}, \delta\theta) \approx 1 - i\delta\theta \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}/\hbar \tag{2.4}$$

où $\mathbf{L} = \mathbf{R} \wedge \mathbf{P}$ est le moment cinétique orbital. Il suffit de vérifier la commutation ci-haut, en réalisant que le membre de droite est $\delta\theta\varepsilon_{ijk} n_j R_k$ au premier ordre :

$$[\mathcal{R}, R_i] = -(i\delta\theta/\hbar)\varepsilon_{jkl} n_j [R_k P_l, R_i] = -\delta\theta\varepsilon_{jki} n_j R_k = -\delta\theta\varepsilon_{jki} n_j R_k \tag{2.5}$$

puisque

$$[R_k P_l, R_i] = R_k [P_l, R_i] = -i\hbar\delta_{il} R_k \tag{2.6}$$

Pour décrire une rotation finie d'angle θ, il suffit d'appliquer la rotation $\mathcal{R}(\mathbf{n}, \theta/N)$ N fois et de faire tendre $N \to \infty$:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(\mathbf{n}, \theta) &= \lim_{N\to\infty} \mathcal{R}(\mathbf{n}, \theta/N)^N \\ &= \lim_{N\to\infty} \left(1 - \frac{i\theta}{\hbar N} \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}\right)^N \end{aligned} \tag{2.7}$$

En utilisant la définition de l'exponentielle, on conclut que

$$\boxed{\mathcal{R}(\mathbf{n}, \theta) = \exp -\frac{i}{\hbar}\theta \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}} \tag{2.8}$$

On constate que cet opérateur de rotation est bel et bien unitaire, puisque $\mathbf{L}$ est un opérateur hermitique.

À l'aide de la définition du moment cinétique orbital, on calcule aisément les relations de commutations suivantes :

$$\begin{aligned} [L_a, R_b] &= i\hbar\varepsilon_{abc} R_c \\ [L_a, P_b] &= i\hbar\varepsilon_{abc} P_c \\ [L_a, L_b] &= i\hbar\varepsilon_{abc} L_c \end{aligned} \tag{2.9}$$

Des opérateurs tels que $\mathbf{R}$, $\mathbf{P}$ et $\mathbf{L}$ qui ont de telles relations de commutations avec $\mathbf{L}$ sont dits *opérateurs vectoriels*.

L'opérateur du moment cinétique peut aussi être attribué en tout ou en partie au moment cinétique intrinsèque (spin). Dans ce cas il n'a pas la représentation ci-haut en fonction de $\mathbf{R}$ et $\mathbf{P}$. L'important est alors la relation entre le moment cinétique et les rotations : le moment cinétique généralisé $\mathbf{J}$ est défini de telle façon que l'opérateur

$$\boxed{\mathcal{R}(\mathbf{n}, \theta) \equiv \exp -\frac{i}{\hbar}\theta \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}}$$

effectue une rotation du système d'un angle θ par rapport à l'axe $\mathbf{n}$. Cette propriété est intimement reliée aux relations de commutations suivantes :

$$\boxed{[J_a, J_b] = i\hbar\varepsilon_{abc} J_c} \tag{2.10}$$

Ces relations de commutation peuvent aussi constituer une définition du moment cinétique : elles déterminent les commutateurs de différentes rotations infinitésimales et, puisque toute rotation finie peut être considérée comme une succession de rotations infinitésimales, elles fixent aussi les relations de commutation entre diverses rotations finies. On peut donc affirmer, quoique la preuve n'en soit pas donnée en détail ici, que les relations (2.10) et (2.9) sont équivalentes.

2.2 États propres du moment cinétique

Ce qui nous intéresse maintenant est l'action des composantes de **J** sur l'espace des états. À cette fin, on définit le carré du moment cinétique : $J^2 = J_a J_a$. Cet opérateur commute avec toutes les composantes de **J**:

$$[J^2, J_a] = 0 \tag{2.11}$$

On peut donc trouver un ensemble de vecteurs propres communs à J^2 et à l'une des composantes de **J**, disons J_3. On note ces vecteurs propres $|m\rangle$, où $m\hbar$ est la valeur propre de J_3: $J_3|m\rangle = m\hbar|m\rangle$ (le nombre m est alors sans unités, puisque $\hbar$ a les unités du moment cinétique ou de l'action).

On définit ensuite les opérateurs

$$J_\pm \equiv J_1 \pm iJ_2 \quad \Longrightarrow \quad \begin{array}{l} [J_3, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm \\ [J_+, J_-] = 2\hbar J_3 \end{array} \tag{2.12}$$

qui agissent comme des opérateurs d'échelle pour la valeur propre $m\hbar$, en raison de la relation de commutation avec J_3:

$$\begin{aligned} J_3 J_\pm|m\rangle &= J_\pm J_3|m\rangle \pm \hbar J_\pm|m\rangle \\ &= (m \pm 1)\hbar J_\pm|m\rangle \end{aligned} \tag{2.13}$$

On voit que $J_\pm|m\rangle$ est proportionnel à $|m \pm 1\rangle$. Comme $[J^2, J_\pm] = 0$, la valeur propre de J^2 n'est pas affectée par l'action de $J_\pm$. On peut exprimer J^2 comme

$$J^2 = J_3^2 + \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) = J_3^2 + \hbar J_3 + J_-J_+ \tag{2.14}$$

Supposons maintenant que l'espace des états admette une valeur maximum de m, qu'on dénote j. Il s'ensuit que $J_+|j\rangle = 0$ et que

$$J^2|j\rangle = \hbar^2(j^2 + j)|j\rangle \tag{2.15}$$

La valeur propre $\hbar^2 j(j+1)$ de J^2 détermine donc la valeur maximum j que peut prendre J_3. Il est ensuite simple de déterminer la constante de proportionnalité dans l'action de J_-:

$$\begin{aligned} ||J_-|m\rangle||^2 &= \langle m|J_+J_-|m\rangle \\ &= \langle m|(J^2 - J_3^2 + \hbar J_3)|m\rangle \\ &= \hbar^2(j(j+1) - m(m-1)) \end{aligned} \tag{2.16}$$

On peut donc écrire

$$J_-|m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}|m-1\rangle \tag{2.17}$$

De même, on obtient que

$$J_+|m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}|m+1\rangle \tag{2.18}$$

On constate que la norme de $J_-|m\rangle$ est négative si m est suffisamment négatif ($m < -j$). Ceci est évidemment impossible et ne peut être évité que si $J_-|m\rangle = 0$ pour une certaine valeur de m, égale à $-j$ d'après le calcul ci-haut. Comme $m = j$ et $m = -j$ doivent être séparés par un entier, on en conclut que j ne peut être qu'entier ou demi-entier :

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots \qquad m = -j, -j+1, \ldots, j-1, j \tag{2.19}$$

Il y a donc $2j+1$ états propres de J_3 pour une valeur donnée de J^2 L'action de J_1 et J_2 sur ces états peut être facilement obtenue par l'action de $J_\pm$. La forme explicite des matrices représentant les générateurs dans la base des $|m\rangle$ peut donc être obtenue facilement.

L'espace des états le plus simple sur lequel le moment cinétique puisse agir est celui d'une particule de spin $\frac{1}{2}$, engendré par deux états $|\frac{1}{2}\rangle$ et $|-\frac{1}{2}\rangle$, tels que $J_-|\frac{1}{2}\rangle = \hbar|-\frac{1}{2}\rangle$ et $J_-|-\frac{1}{2}\rangle = 0$. Les matrices représentant J_3 et $J_\pm$ sont donc

$$J_3 = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \quad J_- = \hbar\begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{pmatrix} \quad J_+ = \hbar\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix} \tag{2.20}$$

ce qui mène à

$$J_1 = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} \quad J_2 = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} \tag{2.21}$$

On écrit donc $J_a = \frac{1}{2}\hbar\sigma_a$, où les σ_a sont les matrices de Pauli :

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{2.22}$$

Notons que les matrices de Pauli obéissent à la relation

$$\sigma_a\sigma_b = \delta_{ab} + i\varepsilon_{abc}\sigma_c \tag{2.23}$$

2.3 Matrices de rotation

Trouvons maintenant une expression explicite pour la matrice de rotation $\mathcal{R}(\mathbf{n},\theta)$ pour une particule de spin j. Il est plus simple de commencer avec le cas $j = \frac{1}{2}$:

$$\mathcal{R}(\mathbf{n},\theta) = \exp -\frac{1}{2}i\theta\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{2.24}$$

Soit U la matrice unitaire 2×2 qui diagonalise $\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$:

$$U\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}U^\dagger = \sigma_3 \tag{2.25}$$

On peut alors écrire

$$\begin{aligned}\mathcal{R}(\mathbf{n},\theta) &= U^\dagger\left(\exp -\frac{1}{2}i\theta\sigma_3\right)U\\ &= U^\dagger\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-i\theta/2} & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{i\theta/2}\end{pmatrix}U\\ &= U^\dagger\left(\cos\frac{1}{2}\theta - i\sigma_3\sin\frac{1}{2}\theta\right)U\\ &= \cos\frac{1}{2}\theta - i\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\sin\frac{1}{2}\theta\end{aligned} \tag{2.26}$$

On peut aussi trouver ce résultat en développant l'exponentielle en série de Taylor et en utilisant la propriété $(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2 = 1$. Le fait le plus remarquable à propos de cette expression est qu'elle est multivoque : la représentation d'une rotation de $\theta = 2\pi$ est la matrice -1, alors que la rotation équivalente de $\theta = 0$ ou $\theta = 4\pi$ donne 1. C'est une caractéristique des représentations de spin demi-entier.

Dans le cas d'un spin arbitraire, la question est un peu moins simple. Les éléments de matrice des opérateurs de rotation dans la base des vecteurs propres de J_z sont appelées *fonctions de Wigner*:

$$D^{(j)}_{m'm}(\mathbf{n},\theta) = \langle j, m'| \exp -i\theta \mathbf{J}\cdot\mathbf{n}/\hbar |j, m\rangle \tag{2.27}$$

Avant d'en donner la forme explicite, rappelons comment une rotation quelconque peut être spécifiée par les trois angles d'Euler. Soit (x, y, z) les coordonnées cartésiennes fixes dans l'espace et (x', y', z') les coordonnées cartésiennes fixes par rapport à un corps rigide imaginaire auquel on fait subir diverses rotations. Pour spécifier complètement une rotation arbitraire, on la décompose ainsi : on effectue une rotation d'angle α par rapport à $\hat{\mathbf{z}}$. Ceci a pour effet de modifier les axes $\hat{\mathbf{x}}'$ et $\hat{\mathbf{y}}'$. On procède ensuite à une rotation d'angle β par rapport à $\hat{\mathbf{y}}'$ (qui ne coincide plus avec $\hat{\mathbf{y}}$). Enfin, on procède à une rotation d'angle γ par rapport à $\hat{\mathbf{z}}'$, qui ne coincide plus avec $\hat{\mathbf{z}}$. La rotation complète peut donc s'écrire

$$\mathcal{R}(\alpha,\beta,\gamma) = \mathcal{R}(\hat{\mathbf{z}}',\gamma)\mathcal{R}(\hat{\mathbf{y}}',\beta)\mathcal{R}(\hat{\mathbf{z}},\alpha) \tag{2.28}$$

Notre but est d'exprimer cet opérateur en fonction de rotations effectuées par rapport aux axes fixes dans l'espace : $\hat{\mathbf{y}}$ et $\hat{\mathbf{z}}$. Pour cela, il suffit de se convaincre des relations suivantes par un petit exercice de visualisation 3D:

$$\begin{aligned}\mathcal{R}(\hat{\mathbf{y}}',\beta) &= \mathcal{R}(\hat{\mathbf{z}},\alpha)\mathcal{R}(\hat{\mathbf{y}},\beta)\mathcal{R}^{-1}(\hat{\mathbf{z}},\alpha)\\ \mathcal{R}(\hat{\mathbf{z}}',\gamma) &= \mathcal{R}(\hat{\mathbf{y}}',\beta)\mathcal{R}(\hat{\mathbf{z}},\gamma)\mathcal{R}^{-1}(\hat{\mathbf{y}}',\beta)\end{aligned} \tag{2.29}$$

À l'aide de ces relations, on démontre aisément que

$$\mathcal{R}(\alpha,\beta,\gamma) = \mathcal{R}(\hat{\mathbf{z}},\alpha)\mathcal{R}(\hat{\mathbf{y}},\beta)\mathcal{R}(\hat{\mathbf{z}},\gamma) \tag{2.30}$$

On obtient ainsi la fonction de Wigner :

$$\begin{aligned}D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma) &= \langle j, m'|\mathrm{e}^{-iJ_z\alpha/\hbar}\mathrm{e}^{-iJ_y\beta/\hbar}\mathrm{e}^{-iJ_z\gamma/\hbar}|j, m\rangle\\ &= \mathrm{e}^{-i(\alpha m'+\gamma m)}\langle j, m'|\mathrm{e}^{-iJ_y\beta/\hbar}|j, m\rangle\\ &\equiv \mathrm{e}^{i(\alpha m'-\gamma m)}d^{(j)}_{m'm}(\beta)\end{aligned} \tag{2.31}$$

On montre (voir exercice 2.3) que

$$\begin{aligned}d^{(j)}_{m'm}(\beta) = \sum_k (-1)^{k-m+m'} &\frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{(j+m-k)!k!(j-k-m')!(k-m+m')!}\\ &\times (\cos\beta/2)^{2j-2k+m-m'}(\sin\beta/2)^{2k-m+m'}\end{aligned} \tag{2.32}$$

où la somme sur k est effectuée sur toutes les valeurs entières de k telles que les factorielles du dénominateur ont des arguments non négatifs.

2.4 Composition du moment cinétique

L'une des questions importantes de la théorie du moment cinétique est la *composition des moments*, c'est-à-dire la construction des états propres du moment cinétique total de plusieurs particules à partir des états propres du moment cinétique de chacune des particules. Nous n'expliquerons pas ici les détails de cette démarche; nous nous contenterons d'énoncer les résultats.

Considérons deux systèmes de moment cinétiques j_1 et j_2 respectivement. Les états de base peuvent être choisis parmi les états propres communs de J_{1z}, J_{2z}, $\mathbf{J}_1^2$ et $\mathbf{J}_2^2$, car ces opérateurs commutent entre eux. Ces $(2j_1+1)(2j_2+1)$ états sont dénotés $|m_1, m_2\rangle$. D'autre part, l'espace des états S peut être décomposé en une somme directe, dont chacun des termes comprend les états ayant une valeur propre donnée de $\mathbf{J}^2$, où $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$ est le moment cinétique total. Il ressort d'une analyse simple que toutes les valeurs de j situées entre $j_1 + j_2$ et $|j_2 - j_1|$ (inclusivement) apparaissent exactement une fois. On écrit donc

$$S_{j_1} \otimes S_{j_2} = S_{j_1+j_2} \oplus S_{j_1+j_2-1} \oplus \cdots \oplus S_{|j_2-j_1|} \tag{2.33}$$

Les coefficients qui expriment les vecteurs propres de $\mathbf{J}^2$ et de J_z (notés $|j, m\rangle$) en fonction des états $|m_1, m_2\rangle$ sont tabulés et portent le nom de *coefficients de Clebsch-Gordan*. La somme (2.33) porte le nom de *série de Clebsch-Gordan*.

3 Théorie des groupes

3.1 Définitions

Les opérations de symétrie décrites en début de chapitre sont telles que la succession de deux opérations de symétrie prise comme un tout est encore une opération de symétrie. Cette propriété est à la base d'une structure mathématique appelée *groupe*. Cette section se veut un survol rapide des concepts les plus simples de la théorie des groupes telle qu'utilisée en physique théorique.

Un *groupe* est un ensemble d'éléments sur lequel une loi de composition (c'est-à-dire un produit) a été définie, satisfaisant aux conditions suivantes :

- Si a et b appartiennent au groupe G, alors le produit ab appartient aussi à G.
- Il existe un élément neutre (ou *identité*), noté e, tel que $ea = ae = a$ pour tout élément a de G.
- Chaque élément a de G possède un inverse a^{-1} tel que $a^{-1}a = aa^{-1} = e$.
- Le produit est associatif : $(ab)c = a(bc)$

Un groupe est dit *abélien* ou *commutatif* si le produit est commutatif : $ab = ba$. Dans le cas contraire, on le dit *non-commutatif*. Un groupe est dit *fini* (resp. infini) s'il contient un nombre fini (resp. infini) d'éléments. L'*ordre* d'un groupe fini est simplement le nombre d'éléments du groupe. Un groupe est *discret* si ses éléments forment une suite discrète, en correspondance avec les entiers, mais pas nécessairement finie. Il est *continu* dans le cas contraire. Un groupe continu est un *groupe de Lie* s'il possède en même temps la structure d'une variété différentiable, c'est-à-dire, si on peut localement le mettre en correspondance avec $\mathbb{R}^d$ pour le paramétriser; d est alors la *dimension* du groupe de Lie.

Un *sous-groupe* est un groupe qui est sous-ensemble d'un autre groupe, avec la même règle de multiplication.

3.2 Exemples

- L'ensemble $\mathbb{Z}$ des nombres entiers est un groupe par rapport à l'addition. Ce groupe est infini, discret et abélien. L'ensemble $\mathbb{R}$ des nombre réels est aussi un groupe par rapport à l'addition, mais un groupe continu. Cependant, $\mathbb{R}$ n'est pas un groupe par rapport à la multiplication car l'élément 0 n'a pas d'inverse.
- L'ensemble des permutations de n objets est un groupe dénoté S_n, le *groupe symétrique* ou *groupe des permutations*. La multiplication est ici la composition des permutations (voir l'appendice 4.A pour un rappel sur les permutations). Il s'agit d'un groupe non abélien et fini, comportant $n!$ éléments.
- L'ensemble des translations de l'espace à trois dimensions est un groupe où le produit est la composition des translations. Ce groupe est abélien, infini et continu (il est en correspondance avec $\mathbb{R}^3$, chaque translation étant caractérisée par un vecteur réel).
- L'ensemble des matrices de rotations dans l'espace à trois dimensions forment un groupe noté $SO(3)$ (pour *Special Orthogonal*). Ce groupe est non abélien et continu. En général $SO(n)$ est le groupe des matrices orthogonales O d'ordre n avec déterminant unité ($\det O = 1$). Le produit de groupe est bien sûr la multiplication des matrices. Bien entendu, $SO(n)$ est un sous-groupe de $SO(n+1)$. Si on relaxe la contrainte $\det O = 1$, on obtient le groupe orthogonal $O(n)$ qui, en plus des éléments de $SO(n)$, contient aussi les réflexions par rapport à un plan quelconque.
- L'ensemble des matrices non singulières d'ordre n forment le groupe $GL(n)$ (pour *General Linear*). Le groupe $SO(n)$ est un sous-groupe de $GL(n)$.
- L'ensemble des matrices unitaires d'ordre n forment le groupe $U(n)$. Si on ajoute la condition que le déterminant soit unité, condition compatible avec la multiplication des matrices, on obtient le groupe $SU(n)$.
- L'ensemble des rotations et des réflexions qui préservent l'aspect d'une structure cristalline forment le *groupe cristallographique* de cette structure. Le groupe cristallographique comporte un nombre fini d'éléments et est un sous-groupe de $O(3)$. On dénombre 32 groupes cristallographiques différents. Si on autorise, en plus des rotations et des réflexions, des translations par un vecteur du réseau cristallin, on peut construire des groupes plus grands, appelés *groupes d'espace*. Il existe 230 groupes d'espace différents.

3.3 Représentations

Un groupe est une structure abstraite, qui peut être représentée par des objets plus concrets, en l'occurence des matrices. Une *représentation* de dimension n d'un groupe G (plus précisément, une *représentation vectorielle*) est un ensemble de matrices d'ordre n qui sont en correspondance avec les éléments du groupe (isomorphisme). Si on désigne par a un élément de G et par $R(a)$ la matrice correspondante, on doit avoir

$$R(ab) = R(a)R(b) \qquad R(a^{-1}) = R(a)^{-1} \tag{3.1}$$

Un même groupe a généralement plusieurs représentations de dimensions différentes.

On distingue parfois la représentation dite *fondamentale*, qui sert à définir certains groupes. Par exemple, l'ensemble des matrices orthogonales qui définit le groupe $SO(3)$ constitue la représentation fondamentale de ce groupe. $SO(3)$ compte cependant une infinité d'autres représentations.

L'espace vectoriel de dimension n sur lequel les matrices d'une représentation agissent est appelé le *module* de la représentation. Malheureusement, un abus de langage courant donne aussi à

cet espace le nom de *représentation*; le contexte aide généralement à distinguer les deux concepts. C'est sur cet espace que résident les objets qui sont transformés par la représentation du groupe. Le module de la représentation fondamentale de $SO(3)$ est simplement l'espace cartésien de dimension 3. En mécanique quantique, les modules sont des sous-espaces de l'espace des états. Par exemple, l'ensemble des états à moment cinétique orbital l dans un atome (oublions le spin pour le moment) forme le module associé à la représentation de dimension $2l+1$ de $SO(3)$.

Une représentation est dite *réductible* si le module V correspondant peut être divisé en une somme directe ($V = V_1 \oplus V_2$) telle que V_1 et V_2 ne sont pas mélangés par l'action du groupe. Cela signifie qu'il est possible de choisir une base dans V telle que toutes les matrices de la représentation sont diagonales par blocs, c.-à-d. qu'un élément de V_1 (ou de V_2) demeure dans V_1 (resp. V_2) quand un élément du groupe agit sur lui par l'intermédiaire de la représentation. Dans le cas contraire, la représentation est *irréductible*. Ce sont ces dernières qui sont intéressantes, puisque les représentations réductibles peuvent être obtenues par somme directe de représentations irréductibles.

Un des résultats importants de la théorie des groupes est le *lemme de Schur*, qui stipule que si une matrice H commute avec tous les éléments d'une représentation irréductible, alors H est proportionnel à l'identité. Si H commute avec tous les éléments d'une représentation réductible, alors H est diagonal, et égal à un multiple de l'identité dans chaque sous-module irréductible, la constante de proportionnalité étant a priori différente dans chaque sous-module. En mécanique quantique, si, en raison d'une symétrie, l'hamiltonien H commute avec tous les éléments d'un groupe de transformation, alors H est une constante dans chaque module irréductible du groupe, c'est-à-dire que tous les états appartenant à un même module irréductible ont la même énergie. *C'est ici le principal avantage de la théorie des groupes en mécanique quantique : la classification des niveaux d'énergie.* On voit comment la présence de symétries dans un système quantique est reliée à une dégénérescence des niveaux d'énergie : les n états indépendants d'une représentation (module) irréductible de dimension n d'un groupe de symétrie de l'hamiltonien ont tous la même énergie, par le lemme de Schur.

Si un groupe est abélien, chaque élément du groupe commute avec tous les autres et le lemme de Schur s'applique à tous les éléments! On conclut que la seule représentation irréductible d'un groupe abélien est de dimension 1. Ceci est effectivement ce que nous avons trouvé dans le cas du groupe de translation, la représentation de $T(a)$ étant donnée par la phase e^{-ika}. Il s'agit bien d'une représentation puisque la propriété de groupe $T(a)T(b) = T(a+b)$ y est fidèlement reproduite : $\mathrm{e}^{-ika}\mathrm{e}^{-ikb} = \mathrm{e}^{-ik(a+b)}$.

Une représentation est dite *unitaire* si toutes ses matrices sont unitaires. En mécanique quantique on s'intéresse uniquement aux représentations de ce type. Deux représentations sont dite *équivalentes* si elles sont reliées par une transformation de similitude, provenant par exemple d'un simple changement de base sur le module. En clair, si A est un élément d'une représentation, alors la représentation formée des éléments SAS^{-1} est équivalente à la première, pourvu que la matrice S soit la même pour tous les éléments de la représentation.

Pour être plus précis, les représentations qui sont pertinentes à la mécanique quantique ne sont pas les représentation vectorielles proprement dites, mais les représentations dites *projectives*, qui sont caractérisées par la relation

$$D(a)D(b) = \mathrm{e}(a,b)D(ab) \tag{3.2}$$

où $\mathrm{e}(a,b)$ est une phase qui dépend des deux éléments a et b Ceci provient du fait que la propriété de groupe doit être satisfaite non pas par des matrices agissant sur des vecteurs, mais sur des états physiques, qui sont des vecteurs modulo une phase arbitraire. L'espace des états est en réalité un *espace projectif*, c.-à-d. un espace vectoriel sur lequel deux vecteurs qui ne diffèrent que par une constante multiplicative sont identifiés. La propriété de groupe s'énonce alors comme suit : les états $D(a)D(b)|\psi\rangle$ et $D(ab)|\psi\rangle$ doivent être équivalents, ce

qui mène à la relation (3.2). Wigner a démontré qu'on pouvait toujours ramener une représentation projective à une représentation vectorielle, parfois multivoque. C'est ce qui se produit dans le cas du groupe $SO(3)$ (voir plus bas).

3.4 Algèbres de Lie

Les générateurs d'un groupe, comme par exemple les composantes du moment cinétique pour le groupe de rotation, sont des opérateurs qui agissent sur le module. En général, ces opérateurs ne commutent pas entre eux. Par exemple, les composantes du moment cinétique obéissent aux relations de commutation (2.10). La forme de ces relations de commutation est intimement liée à la structure du groupe de rotation. En principe, cette relation nous permet de calculer des produits d'opérateurs de rotation à partir de l'Éq.(2.9). Il est alors clair que si on arrive à trouver un ensemble de matrices d'ordre n qui satifont à la relation de commutation ci-haut, il sera possible de trouver une représentation d'ordre n du groupe de rotation, simplement en calculant des exponentielles.

En général, l'ensemble des générateurs d'un groupe de Lie, avec leurs relations de commutation, forment ce qu'on appelle une *algèbre de Lie*. La *dimension* d'une algèbre de Lie est le nombre de générateurs, c'est-à-dire la dimension du groupe de Lie associé. Une représentation d'ordre n d'une algèbre de Lie est, naturellement, un ensemble de matrices d'ordre n qui ont les mêmes relations de commutation entre elles que les générateurs. Le lemme de Schur s'applique aussi à l'algèbre de Lie : si une matrice H commute avec tous les éléments d'une représentation irréductible de l'algèbre de Lie – en fait, avec tous les générateurs dans cette représentation – alors cette matrice est proportionnelle à l'identité.

L'algèbre de Lie associée à un groupe ne fait qu'explorer le voisinage de l'identité du groupe et ne peut refléter la structure *topologique* du groupe de Lie, qui est une propriété globale. Il est donc possible que deux groupes différents, de même dimension, aient la même algèbre de Lie. C'est le cas notamment des groupes $SO(3)$ et $SU(2)$, tous deux de dimension 3, qui partagent la même algèbre de Lie.

3.5 Les groupes $SU(2)$ et $SO(3)$

Concentrons-nous maintenant sur le cas particulier des groupes $SO(3)$ et $SU(2)$ pour illustrer un peu plus explicitement les concepts introduits plus haut.

Le groupe $SU(2)$ est formé de l'ensemble des matrices unitaire d'ordre 2 avec déterminant unité. Ces matrices ont donc la forme suivante :

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \qquad |a|^2 + |b|^2 = 1 \tag{3.3}$$

La contrainte $|a|^2 + |b|^2 = 1$ signifie que chaque élément de $SU(2)$ correspond à un point sur la sphère S_3 de rayon unité plongée dans l'espace $\mathbb{R}^4$: il suffit de poser $a = x_1 + ix_2$ et $b = x_3 + ix_4$ pour s'en assurer.

Les matrices de rotations (2.26) calculées pour le spin $\frac{1}{2}$ forment en fait la représentation fondamentale de $SU(2)$. Il est en effet très simple de démontrer que les matrices (2.26) sont unitaires et ont une déterminant unité, pour toutes les valeurs de $\mathbf{n}$ et de θ. Il en ressort que les générateurs de $SU(2)$ sont proportionnels aux matrices de Pauli et qu'ils ont les mêmes relations de commutation que les composantes du moment cinétique : $SU(2)$ et $SO(3)$ ont la même algèbre de Lie. On peut aussi le voir de la façon suivante : si U est une matrice unitaire d'ordre 2 très proche de l'identité, on peut l'écrire comme $U \sim 1 - iK$, où K est une matrice hermitique. Puisque $\det(1-iK) \sim 1 - i\,\mathrm{Tr}\,K$,

la contrainte $\det U = 1$ devient alors $\operatorname{Tr} K = 0$. Donc K est une matrice hermitique d'ordre 2 sans trace et doit de ce fait être une combinaison linéaire des trois matrices de Pauli.

Dans la section 2.2 nous avons, sans le dire, construit les représentations irréductibles de l'algèbre de Lie de $SU(2)$ et $SO(3)$. En effet, les $2j+1$ états permettent de construire une représentation des générateurs J_3 et $J_\pm$ et cette représentation est irréductible par construction : tous les états peuvent être obtenus par action successive de J_- sur un seul état; il n'y a donc pas d'état qui ne puisse être relié à un autre par l'action de $J_\pm$.

Les représentations de $SO(3)$ de spin demi-entier ($j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots$) ont la particularité d'être multivoques, c'est-à-dire qu'à chaque rotation correspondent plus d'une matrice (ici, deux matrices). Ceci se voit facilement pour la représentation (2.26): il suffit de faire $\theta \to \theta + 2\pi$ pour voir que $\mathcal{R}(\mathbf{n}, \theta)$ change de signe, alors que la rotation correspondante est la même. Le même ensemble de matrices n'est pas multivoque si on le considère comme une représentation de $SU(2)$ car, bien évidemment, il s'agit de la représentation qui *définit* le groupe $SU(2)$.

La possibilité de représentations multivoques de $SO(3)$ est liée à la structure topologique du groupe $SO(3)$; plus précisément, au fait que $SO(3)$ est doublement connexe ($\pi_1(SO(3)) = \mathbb{Z}_2$). Pour démontrer ceci, il suffit de remarquer qu'on peut représenter géométriquement $SO(3)$ comme l'intérieur et la surface d'une sphère de rayon π dont les points opposés sont identifiés. Un point dans cette sphère peut être représenté par le triplet (ξ, θ, φ) en coordonnées sphériques, où $\xi \in [0, \pi]$ est la coordonnée radiale et où (π, θ, φ) est identifié à $(\pi, \pi - \theta, \varphi + \pi)$. La direction spécifiée par θ et φ est alors l'axe de rotation et ξ est l'angle de rotation par rapport à cet axe. Le fait que les points opposés de la sphère soient identifiés est essentiel et signifie qu'une rotation de π autour d'un axe est équivalente à une rotation de $-\pi$.

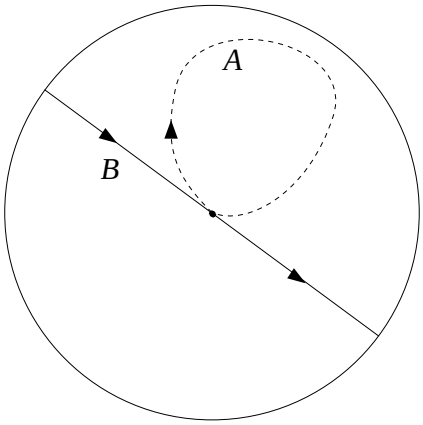


Figure 3.1. Deux courbes fermées dans $SO(3)$ qui ne sont pas homotopes.

Considérons maintenant une courbe fermée dans $SO(3)$, c'est-à-dire une succession de rotations pouvant représenter physiquement le mouvement d'un corps rigide qui revient à la fin à son orientation de départ. Le fait que $SO(3)$ soit doublement connexe signifie qu'il existe deux catégories de courbes fermées qui ne peuvent être déformées continuement l'une dans l'autre. Elles sont illustrées à la figure 3.1. L'une de ces courbes fermées correspond à un mouvement rotatoire de 2π autour d'un axe et ne peut être déformé continuement vers un mouvement rotatoire fermé composé de petites rotations (c.-à-d. proche du centre de la sphère $SO(3)$).

4 Lois de conservation

4.1 Théorème de Noether

Le *théorème de Noether* stipule que si le lagrangien d'un système classique est invariant par rapport à une certaine transformation continue, alors il existe une quantité conservée associée à cette transformation. Plus précisément, à chaque paramètre du groupe de transformation correspond une quantité conservée. Par exemple, la quantité conservée associée à l'invariance par rapport aux translations est l'impulsion; celle associée à l'invariance par rapport aux rotations est le moment cinétique. En d'autres termes, l'invariance du lagrangien par rapport à un groupe de transformations a comme conséquence la conservation des générateurs du groupe.

Démontrons ce théorème qui s'applique, rappelons-le, dans le cadre de la mécanique classique. Appelons q la coordonnée généralisée, ou l'ensemble des coordonnées généralisées rassemblées dans un vecteur. Supposons que le lagrangien $L(\dot{q}, q)$ soit invariant par un groupe continu de transformations et en particulier par rapport aux transformations infinitésimales $\delta q = \mathrm{e}F(q)$, où e est un paramètre infinitésimal et F est une fonction de q. La variation de la dérivée temporelle de q est $\delta\dot{q} = \mathrm{e}\dot{F}(q)$. La variation du lagrangien lors de cette transformation est nulle par hypothèse; cependant, cette variation est formellement

$$\begin{aligned}\delta L &= \mathrm{e}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\dot{F}(q) + \frac{\partial L}{\partial q}F(q)\right)\\ &= \mathrm{e}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\dot{F}(q) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}F(q)\right)\\ &= \mathrm{e}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}F(q)\right)\end{aligned} \tag{4.1}$$

Dans la deuxième équation nous avons utilisé l'équation du mouvement d'Euler-Lagrange. Étant donné que $\delta L = 0$, il s'ensuit que la quantité

$$\boxed{Q \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}F(q) = pF(q)} \tag{4.2}$$

est conservée.

Comme exemple, considérons le lagrangien d'une particule libre : $L = \frac{1}{2}m\dot{q}^2$. Ce lagrangien est invariant par rapport aux translations puisqu'il n'y a pas de potentiel. Comme dans ce cas $F(q) = 1$, on trouve que l'impulsion p est conservée. Dans le cas d'un lagrangien invariant par rapport aux rotations par rapport à l'axe $\mathbf{n}$, on a $\delta\mathbf{r} = \delta\theta\mathbf{n} \wedge \mathbf{r}$ et donc la quantité conservée est

$$\mathbf{p} \cdot (\mathbf{n} \wedge \mathbf{r}) = \mathbf{n} \cdot (\mathbf{r} \wedge \mathbf{p}) \tag{4.3}$$

c'est-à-dire la composante du moment cinétique dans la direction $\mathbf{n}$.

4.2 Écoulements de symétrie

Dans la formulation hamiltonienne, une opération de symétrie continue se trouve à effectuer un *écoulement* dans l'espace des phases en fonction du paramètre de la transformation. Par exemple, une rotation d'un angle θ autour d'un axe $\mathbf{n}$ a un effet sur la position $\mathbf{r}$ et sur l'impulsion $\mathbf{p}$ de sorte qu'un point dans l'espace des phases décrit une trajectoire virtuelle lorsque θ est varié. L'évolution

temporelle est un cas particulier d'écoulement, pour lequel l'hamiltonien H est le générateur. Pour une opération de symétrie générale on considère le générateur Q en fonction duquel les variations de p et de q sous une transformation infinitésimale sont

$$\delta q = \mathrm{e}\frac{\partial Q}{\partial p} \qquad\qquad \delta p = -\mathrm{e}\frac{\partial Q}{\partial q} \tag{4.4}$$

Ces équations sont l'équivalent des équations du mouvement de Hamilton pour des opérations de symétrie autres que l'évolution temporelle. Il s'ensuit que la variation d'une fonction quelconque $G(p,q)$ par rapport à une transformation infinitésimale est

$$\delta G = \mathrm{e}[G,Q] \tag{4.5}$$

Si l'hamiltonien H est invariant par rapport à la transformation, son crochet de Poisson avec Q s'annule : $[H,Q]=0$. Donc la fonction $Q(p,q)$ est aussi invariante par rapport à l'évolution temporelle. On voit que cette fonction doit coïncider avec celle obtenue par le théorème de Noether; c'est aussi évident par la variation δq de la coordonnée.

La transposition de ces énoncés en mécanique quantique est directe, en vertu des règles de la quantification canonique. La variation d'un opérateur G lors d'une transformation infinitésimale est $i\hbar\delta G = \mathrm{e}[G,Q]$, où maintenant le crochet de Poisson est remplacé par un commutateur. Le générateur de la symétrie est naturellement conservé, puisqu'il commute avec l'hamiltonien. Le théorème de Noether, même s'il est démontré dans le cadre de la mécanique classique, a donc des incidences en mécanique quantique car les quantités conservées sont les mêmes. Nous verrons plus tard comment le théorème de Noether s'applique aux systèmes ayant un très grand nombre de degrés de liberté.

Un système à N degrés de liberté est qualifié d'*intégrable* s'il possède N quantités F_i (dont l'hamiltonien) qui commutent mutuellement : $[F_i,F_j]=0$. On dit que le système possède N constantes du mouvement en involution. Par exemple, l'atome d'hydrogène non relativiste possède trois constantes du mouvement en involution : l'énergie, le carré du moment cinétique et la composante en z du moment cinétique. Tous les systèmes ne sont pas intégrables. Par exemple, on voit difficilement comment un système chaotique pourrait l'être. Un système intégrable peut être décrit en mécanique quantique par un E.C.O.C. comportant N opérateurs et les états sont spécifés par N *bons* nombres quantiques. Dans un système non intégrable, il y aura moins de nombres quantiques mais la dégénérescence sera réduite d'autant.

Problème 4.1 *Transformations de Galilée*

Lors d'un changement de référentiel inertiel à faible vitesse, on applique aux coordonnées une transformation de Galilée :

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{v}t \qquad , \qquad t' = t$$

L'impulsion d'une particule de masse m se transforme alors ainsi : $\mathbf{p}' = \mathbf{p} - m\mathbf{v}$. En mécanique quantique, une telle transformation est représentée par un opérateur unitaire $G(\mathbf{v},t)$ ayant l'effet suivant sur les opérateurs $\mathbf{R}$ et $\mathbf{P}$:

$$G^\dagger(\mathbf{v},t)\mathbf{R}G(\mathbf{v},t) = \mathbf{R} - \mathbf{v}t$$

$$G^\dagger(\mathbf{v},t)\mathbf{P}G(\mathbf{v},t) = \mathbf{P} - m\mathbf{v}$$

a) Trouvez une expression pour $G(\mathbf{v},t)$ en fonction de $\mathbf{R}$, $\mathbf{P}$, $\mathbf{v}$ et t. Indice : commencez par le cas $t=0$. Notez aussi que $\mathbf{v}$ joue ici le rôle d'un paramètre dans la transformation et non celui d'une variable dynamique.

b) On définit le générateur $\mathbf{K}_t$ de cette transformation par

$$G(\mathbf{v},t) = \exp -i\mathbf{v}\cdot\mathbf{K}_t$$

Donnez une expression pour $\mathbf{K}_t$.

Problème 4.2 *Moment cinétique et oscillateurs*

Nous allons ici étudier une formulation du moment cinétique proposée par Schwinger, utilisant les opérateurs d'échelles de deux oscillateurs harmoniques découplés a et b. Ces opérateurs et leurs conjugués satisfont aux relations de commutations suivantes :

$$[a, a^\dagger] = [b, b^\dagger] = 1 \qquad\qquad [a, b] = [a, b^\dagger] = 0$$

On utilise aussi les opérateurs de nombre $N_a = a^\dagger a$ et $N_b = b^\dagger b$. On définit ensuite les opérateurs suivants :

$$J_+ = \hbar a^\dagger b \qquad J_- = \hbar b^\dagger a \qquad J_z = \frac{1}{2}\hbar(N_a - N_b)$$

a) Montrez que ces trois opérateurs satisfont aux règles de commutations du moment cinétique (d'où la notation utilisée).

b) Montrez que l'opérateur du carré du moment cinétique est alors

$$J^2 = \hbar^2 \frac{1}{2} N(\frac{1}{2}N + 1) \qquad\qquad (N \equiv N_a + N_b)$$

et donc que la valeur propre n de N correspond à $2j$.

c) Si $|0\rangle$ désigne l'état fondamental des deux oscillateurs (annihilé par a et b) exprimez les états propres normalisés $|j, m\rangle$ de J_z en fonction de $|0\rangle$ et des opérateurs d'échelle $a^\dagger$ et $b^\dagger$, c.-à-d. montrez que

$$|j, m\rangle = \frac{(a^\dagger)^{j+m}(b^\dagger)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}|0\rangle$$

Vérifiez aussi que l'action de $J_\pm$ sur $|j, m\rangle$ coïncide avec celle obtenue à l'aide des relations de commutation du moment cinétique.

Problème 4.3 *Matrices de rotation*

On s'intéresse ici à l'action des matrices de rotations sur les $2j + 1$ états de moment cinétique j, c'est-à-dire aux fonctions de Wigner

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta) = \langle j, m'|d|j, m\rangle$$

où d est l'opérateur suivant :

$$d = \exp(-i\beta J_y/\hbar)$$

Démontrez la formule explicite suivante :

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta) = \sum_k (-1)^{k-m+m'} \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{(j+m-k)!k!(j-k-m')!(k-m+m')!} \times (\cos\beta/2)^{2j-2k+m-m'}(\sin\beta/2)^{2k-m+m'}$$

La somme sur k est effectuée sur toutes les valeurs entières de k telles que les factorielles du dénominateur ont des arguments non négatifs.

Indices :

1. Exprimez les états $|j, m\rangle$ à l'aide de la formulation de Schwinger (cf. problème précédent).
2. Remplacez $d(a^\dagger)^n d^{-1}$ par $(da^\dagger d^{-1})^n$.
3. Utilisez les résultats de problème 4.3(b) pour calculer $da^\dagger d^{-1}$.
4. La formule du binôme sera utile :

$$(x + y)^n = \sum_k \frac{n!}{k!(n-k)!} x^{n-k} y^k$$

Problème 4.4 *Opérateurs vectoriels*

Par définition, un opérateur vectoriel $\mathbf{A}$ se transforme comme un vecteur lors d'une rotation; sa relation de commutation avec le moment cinétique est alors

$$[J_a, A_b] = i\hbar\varepsilon_{abc}A_c$$

(on note $A_1 = A_x$, $A_2 = A_y$ et $A_3 = A_z$). On définit les composantes complexes $A_\pm = A_x \pm iA_y$. Considérons un système invariant par rapport aux rotations (du moins, en première approximation) dont les états propres sont indexés par j, m (relatifs au moment cinétique) et un nombre quantique supplémentaire k (e.g. le nombre quantique principal); on note ces états $|k, j, m\rangle$.

a) Écrivez les relations de commutation entre, d'une part, les composantes $J_z, J_\pm$ et, d'autre part, A_z, $A_\pm$.

b) Démontrez les règles de sélection suivantes :

$$\langle k, j, m|A_z|k', j', m'\rangle = 0 \quad \text{sauf si} \quad m = m'$$
$$\langle k, j, m|A_\pm|k', j', m'\rangle = 0 \quad \text{sauf si} \quad m = m' \pm 1$$

c) Démontrez que, dans un sous-espace où k et j sont fixes, les opérateurs $\mathbf{J}$ et $\mathbf{A}$ sont propotionnels, c.-à-d.

$$\langle k, j, m|\mathbf{A}|k, j, m'\rangle = \alpha(k, j)\langle k, j, m|\mathbf{J}|k, j, m'\rangle$$

où la constante $\alpha(k, j)$ ne dépend pas de m. Démontrez que

$$\alpha(k, j) = \frac{\langle \mathbf{J} \cdot \mathbf{A}\rangle}{j(j+1)\hbar^2}$$

où la valeur moyenne est prise à k et j constant.

Il s'agit ici d'une application particulière du théorème de *Wigner-Eckart*.

Problème 4.5 *États cohérents de spin*

Considérons une particule de spin $\frac{1}{2}$ et utilisons pour décrire son spin la base des états propres de J_z [les spineurs $(1, 0)$ et $(0, 1)$]. Soit $|\mathbf{n}\rangle$ l'état propre de $\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}$ avec valeur propre $+\frac{1}{2}\hbar$; on l'appelle 'état cohérent de spin'. On spécifiera le vecteur unité $\mathbf{n}$ par les angles polaires (θ, φ).

a) Démontrez que l'état $|\mathbf{n}\rangle$ est donné par le spineur suivant :

$$\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-i\varphi/2}\cos\frac{1}{2}\theta \\ \mathrm{e}^{i\varphi/2}\sin\frac{1}{2}\theta \end{pmatrix}$$

b) Démontrez que $\langle \mathbf{n}|\mathbf{J}|\mathbf{n}\rangle = \frac{1}{2}\hbar\mathbf{n}$.

c) Démontrez la relation de complétude suivante :

$$\frac{1}{2\pi}\int \mathrm{d}\mathbf{n}\ |\mathbf{n}\rangle\langle\mathbf{n}| = 1 \qquad (d\mathbf{n} = \sin\theta d\theta d\varphi)$$

Problème 4.6 *Évolution temporelle d'un dipôle magnétique*

Un faisceau de neutrons pénètre dans une région comportant un champ magnétique uniforme $\mathbf{B} = B\mathbf{n}$ où $\mathbf{n}$ est une direction quelconque. Les neutrons possèdent un moment magnétique $\boldsymbol{\mu} = \mu\boldsymbol{\sigma}$, où μ est une constante et ils interagissent avec le champ magnétique par l'hamiltonien de Zeeman $H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$. Démontrez que l'opérateur du moment magnétique évolue dans le temps de la façon suivante :

$$\boldsymbol{\mu}(t) = \boldsymbol{\mu}_0\cos^2\omega t + (\boldsymbol{\mu}_0 \wedge \mathbf{n})\sin 2\omega t + [\mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\mu}_0) - (\mathbf{n} \wedge \boldsymbol{\mu}_0) \wedge \mathbf{n}]\sin^2\omega t$$

où $\boldsymbol{\mu}_0$ est le moment magnétique à $t = 0$ et $\omega = \mu B$. Notez qu'en tant qu'opérateur, $\boldsymbol{\mu}$ ne coincide pas avec $\mu\boldsymbol{\sigma}$ en général, mais seulement à certains instants.

Problème 4.7 *Résonance magnétique*

L'hamiltonien d'une particule de spin $\frac{1}{2}$ placée dans un champ magnétique $\mathbf{B}$ contient le terme suivant :

$$H = -\mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$$

On écrit $\mu = gq\hbar/2mc$, où m est la masse de la particule, q sa charge et g est le facteur de Landé (~ 2 pour un électron). Supposons que le champ magnétique appliqué contienne une forte composante selon $\hat{\mathbf{z}}$, constante dans le temps, et une composante (en général plus petite) dans le plan xy, qui tourne dans ce plan avec une fréquence ω:

$$\mathbf{B} = B_0 \hat{\mathbf{z}} + B_1(\hat{\mathbf{x}} \cos \omega t + \hat{\mathbf{y}} \sin \omega t)$$

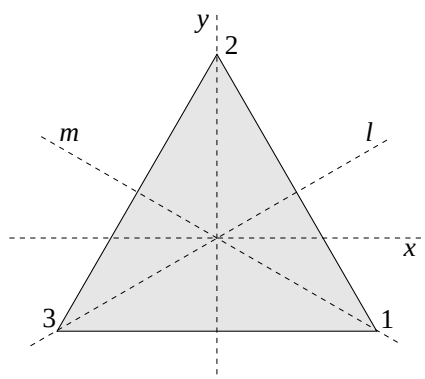
On emploie la notation $\hbar\omega_0 = \mu B_0$ et $\hbar\omega_1 = \mu B_1$.

Obtenez l'expression pour la matrice unitaire qui effectue le passage vers un référentiel tournant avec le champ magnétique B_1. Ensuite, dans ce référentiel, écrivez les équations du mouvement pour le spineur (α, β) représentant l'état du spin. Résolvez cette équation, avec la condition initiale $\beta(0) = 0$ (état $|\uparrow\rangle$ au temps $t = 0$). Écrivez la probabilité de trouver le spin dans l'état $|\downarrow\rangle$ en fonction du temps t.

Problème 4.8 *Le groupe D_3*

L'un des 32 groupes cristallographiques est le groupe D_3, défini par les opérations suivantes : on considère un objet ayant la symétrie d'un triangle équilatéral solide dont les deux faces sont identiques (voir figure). Les rotations qui laissent invariante la configuration spatiale de l'objet sont

E	$= R(\hat{\mathbf{z}}, 0)$	la transformation identité.
A	$= R(\hat{\mathbf{z}}, 2\pi/3)$	une rotation de 120° par rapport à l'axe z.
B	$= R(\hat{\mathbf{z}}, 4\pi/3)$	une rotation de 240° par rapport à l'axe z.
K	$= R(\hat{\mathbf{y}}, \pi)$	une rotation de 180° par rapport à l'axe y.
L	$= R(\hat{\ell}, \pi)$	une rotation de 180° par rapport à l'axe ℓ.
M	$= R(\hat{\boldsymbol{m}}, \pi)$	une rotation de 180° par rapport à l'axe m.



a) Vérifiez que cet ensemble d'opérations constitue un groupe, en fait un sous-groupe de $SO(3)$. Pour ce faire, construisez la table de multiplication, en indiquant bien lequel des axes correspond au facteur de gauche dans le produit, et vérifiez que cette table est fermée.

b) Écrivez explicitement l'effet de ces six transformations sur les coordonnées. Par exemple, $K : (x, y, z) \to (x', y', z') = (-x, y, -z)$.

c) On définit l'effet d'une transformation R sur une fonction $\phi(\mathbf{x})$ comme suit : $\phi' = R\phi$ telle que $\phi'(\mathbf{x}') = \phi(\mathbf{x})$. Autrement dit, la fonction transformée au point transformé coïncide avec l'ancienne fonction à l'ancien point. Montrez que les six fonctions suivantes

$$\begin{aligned}
\phi_1(\mathbf{x}) &= 2xy \\
\phi_2(\mathbf{x}) &= x^2 - y^2 \\
\phi_3(\mathbf{x}) &= 2yz \\
\phi_4(\mathbf{x}) &= -2zx \\
\phi_5(\mathbf{x}) &= x^2 + y^2 + z^2 \\
\phi_6(\mathbf{x}) &= 2z^2 - x^2 - y^2
\end{aligned} \tag{4.6}$$

forment la base d'une représentation vectorielle de D_3 et que cette représentation est la somme directe de 4 représentations irréductibles formées respectivement par les fonctions (ϕ_1, ϕ_2), (ϕ_3, ϕ_4), ϕ_5 et ϕ_6.

d) Considérez maintenant un niveau d'énergie $l = 2$ dans un atome. Les fonctions d'ondes formant la représentation $l = 2$ du groupe $SO(3)$ sont les harmoniques sphérique $Y_{m,2}$:

$$\begin{aligned} Y_{\pm 2,2} &= \frac{1}{r^2}\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\,(x \pm iy)^2 \\ Y_{\pm 1,2} &= \mp\frac{1}{r^2}\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\,(x \pm iy)z \\ Y_{0,2} &= \frac{1}{r^2}\sqrt{\frac{5}{16\pi}}\,(3z^2 - r^2) \end{aligned}$$

Les cinq états décrits par ces fonctions d'onde sont dégénérés si l'atome est isolé. Si cet atome est placé dans un cristal de groupe D_3, alors à l'hamiltonien de cet atome on devra ajouter une perturbation décrivant le champ électrique cristallin, invariante par rapport à D_3, mais non par rapport à tout le groupe $SO(3)$. En combien de sous-niveaux un niveau $l = 2$ sera-t-il scindé par le champ cristallin? Quelles seront les fonctions propres associées, par rapport aux harmoniques sphériques?

CHAPITRE 3

Théorie des perturbations

Très peu de systèmes possèdent des hamiltoniens qui peuvent être diagonalisés exactement. La plupart du temps nous devons employer des méthodes d'approximation ou des méthodes numériques. La méthode particulière que nous étudierons dans ce chapitre suppose que l'hamiltonien H d'un système peut être décomposé en une partie H_0 (l'hamiltonien *non perturbé*) dont nous connaissons les vecteurs propres, plus un terme H_1 (la *perturbation*) qui est supposé petit par rapport à H_0. Pour exploiter plus clairement la petitesse de la perturbation, on l'écrit souvent sous la forme λV, où λ est un paramètre petit qui dépend du problème, alors que V est un opérateur de 'grandeur' normale.

1 Perturbations stationnaires

Dans cette section nous étudions le cas particulier où l'hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps et où son spectre est discret.

1.1 Série de Brillouin-Wigner

Écrivons l'hamiltonien comme

$$H = H_0 + \lambda V \tag{1.1}$$

et appelons $|n\rangle$ les états propres de H_0, avec niveaux d'énergie ε_n. On suppose que ces états et énergies nous sont connus. Appelons $|N\rangle$ et E_n les états propres et niveaux d'énergie de H:

$$H_0|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle \qquad\qquad H|N\rangle = E_n|N\rangle \tag{1.2}$$

Les niveaux E_n, comme les états correspondants, sont des fonctions de λ. Si $\lambda = 0$ les deux ensembles d'états et de niveaux doivent coïncider. On supposera que $E_n(\lambda)$ admet un développement en série de puissances de λ:[1]

$$E_n(\lambda) = \varepsilon_n + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots$$

Dans ce cas, le vecteur propre $|N\rangle$ doit aussi admettre un développement en série :

$$|N\rangle = |n\rangle + \lambda|N^{(1)}\rangle + \lambda^2|N^{(2)}\rangle + \cdots \tag{1.3}$$

L'équation du vecteur propre $|N\rangle$ peut s'écrire ainsi :

$$(E_n - H_0)|N\rangle = \lambda V|N\rangle \tag{1.4}$$

[1] Ce n'est pas a priori évident : en principe il peut exister des corrections *non perturbatives* qui, même si elles s'annulent avec λ, ne peuvent être développées en série de λ autour du point $\lambda = 0$.

En multipliant par $\langle m|$ on obtient

$$(E_n - \varepsilon_m)\langle m|N\rangle = \lambda\langle m|V|N\rangle \to \langle m|N\rangle = \frac{\lambda\langle m|V|N\rangle}{E_n - \varepsilon_m} \tag{1.5}$$

L'arbitraire dans le vecteur $|N\rangle$ nous permet de le choisir tel que $\langle n|N\rangle = 1$. $|N\rangle$ n'est alors pas normalisé: $\langle N|N\rangle > 1$. D'autre part, on peut décomposer $|N\rangle$ selon la base des $|m\rangle$:

$$|N\rangle = \langle n|N\rangle|n\rangle + \sum_{m\neq n}\langle m|N\rangle|m\rangle \tag{1.6}$$

On peut donc écrire les équations implicites suivantes :

$$E_n = \varepsilon_n + \lambda\langle n|V|N\rangle \tag{1.7}$$

$$|N\rangle = |n\rangle + \lambda\sum_{m\neq n}|m\rangle\frac{\langle m|V|N\rangle}{E_n - \varepsilon_m} \tag{1.8}$$

Jusqu'ici aucune approximation n'a été faite. Si λ est petit, on peut supposer que $E_n = \varepsilon_m$ et $|N\rangle = |n\rangle$ en première approximation, en ensuite substituer ces valeurs dans les membres de droite des équations (1.7) et (1.8) pour avoir une meilleure approximation et recommencer le processus avec une nouvelle substitution, et ainsi de suite. Ce procédé produit une série en puissances de λ. Si on ne fait que substituer $|N\rangle$ en laissant E_n tel quel, on obtient la série de *Brillouin-Wigner :*

$$\begin{aligned}|N\rangle = |n\rangle &+ \lambda\sum_{m\neq n}|m\rangle\frac{\langle m|V|n\rangle}{E_n - \varepsilon_m}\\ &+ \lambda^2\sum_{r,m\neq n}|r\rangle\frac{\langle r|V|m\rangle\langle m|V|n\rangle}{(E_n - \varepsilon_r)(E_n - \varepsilon_m)}\\ &+ \lambda^3\sum_{r,m,s\neq n}|s\rangle\frac{\langle s|V|r\rangle\langle r|V|m\rangle\langle m|V|n\rangle}{(E_n - \varepsilon_s)(E_n - \varepsilon_r)(E_n - \varepsilon_m)} + \cdots\end{aligned} \tag{1.9}$$

La substitution de cette série dans (1.7) donne une série analogue pour E_n, qui est en fait une équation implicite pour E_n ordre par ordre :

$$\begin{aligned}E_n = \varepsilon_n &+ \lambda\langle n|V|n\rangle + \lambda^2\sum_{m\neq n}\frac{|\langle m|V|n\rangle|^2}{E_n - \varepsilon_m}\\ &+ \lambda^3\sum_{r,m\neq n}\frac{\langle n|V|r\rangle\langle r|V|m\rangle\langle m|V|n\rangle}{(E_n - \varepsilon_r)(E_n - \varepsilon_m)}\\ &+ \lambda^4\sum_{r,m,s\neq n}\frac{\langle n|V|s\rangle\langle s|V|r\rangle\langle r|V|m\rangle\langle m|V|n\rangle}{(E_n - \varepsilon_s)(E_n - \varepsilon_r)(E_n - \varepsilon_m)} + \cdots\end{aligned} \tag{1.10}$$

Il faut garder en tête que (1.9) n'est pas tel quel une authentique série en puissances de λ, puisque E_n est aussi une série en λ qu'il faut substituer dans (1.9) pour obtenir enfin une véritable série en puissances de λ: la série de *Rayleigh-Schrödinger*. Cependant, s'il est possible de résoudre (1.10) explicitement pour E_n à une ordre donné, la solution approchée est meilleure que celle obtenue par

la série de Rayleigh-Schrödinger au même ordre. Voyons ce que la série de Rayleigh-Schrödinger donne aux premier et deuxième ordres.

Au premier ordre en λ, la série (1.10) donne le résultat bien connu pour le déplacement des niveaux d'énergie :

$$\boxed{E_n = \varepsilon_n + \lambda\langle n|V|n\rangle} \tag{1.11}$$

Le déplacement de E_n de sa valeur à $\lambda = 0$ est simplement la valeur moyenne de la perturbation dans l'état propre correspondant. L'état propre perturbé s'obtient alors en substituant le résultat d'ordre zéro $E_n = \varepsilon_n$ dans (1.9):

$$\boxed{|N\rangle = |n\rangle + \lambda \sum_{m\neq n} |m\rangle \frac{\langle m|V|n\rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_m}} \tag{1.12}$$

Au 2e ordre en λ, l'expression de E_n à l'ordre 0 en λ doit être substituée dans (1.10). On obtient alors (cf. Éq.(1.2))

$$\boxed{E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n} \frac{|\langle m|V|n\rangle|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_m}} \tag{1.13}$$

Notons que la correction apportée au niveau fondamental au 2e ordre sera toujours négative, puisque $\varepsilon_0 - \varepsilon_m < 0$. On peut donc toujours abaisser l'énergie du fondamental par une perturbation qui n'a pas de valeur moyenne dans cet état.

Pour calculer $|N\rangle$ au deuxième ordre on doit substituer dans le 3e terme de (1.9) l'expression à l'ordre zéro de E_n et dans le 2e terme l'expression à l'ordre un de E_n. On doit aussi procéder au développement suivant :

$$\frac{1}{E_n - \varepsilon_m} \approx \frac{1}{\varepsilon_n - \varepsilon_m + \lambda\langle n|V|n\rangle} \approx \frac{1}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} - \lambda \frac{\langle n|V|n\rangle}{(\varepsilon_n - \varepsilon_m)^2} \tag{1.14}$$

On obtient finalement

$$|N^{(2)}\rangle = \sum_{m,r\neq n} \frac{\langle r|V|m\rangle\langle m|V|n\rangle}{(\varepsilon_n - \varepsilon_m)(\varepsilon_n - \varepsilon_r)}|r\rangle - \langle n|V|n\rangle \sum_{m\neq n} \frac{\langle m|V|n\rangle}{(\varepsilon_n - \varepsilon_m)^2}|m\rangle \tag{1.15}$$

1.2 Renormalisation de la fonction d'onde

Rappelons que la condition $\langle n|N\rangle = 1$ signifie que $|N\rangle$ n'est pas normalisé ordre par ordre. Pour obtenir un état normalisé $|\bar{N}\rangle$ il faut diviser par $Z = \langle N|N\rangle^{1/2}$. Cette constante est aussi une série en λ et cette multiplication porte le nom de *renormalisation de la fonction d'onde*. En se servant de la série (1.9), on constate facilement que le premier terme non trivial dans le développement de $\langle N|N\rangle$ est d'ordre λ^2:

$$\langle N|N\rangle = 1 + \lambda^2 \sum_{m\neq n} \frac{|\langle m|V|n\rangle|^2}{(\varepsilon_n - \varepsilon_m)^2} + \cdots \tag{1.16}$$

En général, on peut démontrer le résultat suivant :

$$\langle N|N\rangle^{-1} = \frac{\partial E_n}{\partial \varepsilon_n} \tag{1.17}$$

L'expression de $|\bar{N}\rangle$ au 2e ordre s'obtient donc en multipliant l'expression correspondante pour $|N\rangle$ par $\langle N|N\rangle^{-1/2}$, ce qui revient à ajouter à cette dernière le terme suivant :

$$-\frac{1}{2}\lambda^2 \sum_{m\neq n} \frac{|\langle m|V|n\rangle|^2}{(\varepsilon_n - \varepsilon_m)^2}|n\rangle \tag{1.18}$$

1.3 Exemple : polarisabilité d'un atome

Considérons un atome à un électron qu'on plonge dans un champ électrique $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{z}}$. Sous l'influence de ce champ, l'atome développe un moment dipolaire $\mathbf{d}$ qui est en général proportionnel au champ appliqué: $\mathbf{d} = \alpha\mathbf{E}$, où la constante α, qui a les unités d'un volume (L^3) dans le système gaussien, est appelée *polarisabilité* de l'atome. Cette constante est directement reliée à la constante diélectrique du gaz formé des atomes en question. La question est ici de calculer α à l'aide de la théorie des perturbations.

Les états non-perturbés de ce système seront notés $|n, l, m\rangle$, où n est le nombre quantique principal, l le nombre quantique orbital et m le nombre quantique magnétique. L'énergie de cet état ne dépend pas de m, en raison de l'invariance sous rotation. Dans l'atome d'hydrogène, l'énergie ne dépend pas non plus de l.[2] Pour fins d'illustration, considérons cependant un atome plus général dans lequel un électron se déplace dans le potentiel du noyau et le potentiel moyen créé par les autres électrons (approximation de Hartree) et calculons la contribution de cet électron à la polarisabilité α.

Soit H_0 l'hamiltonien non perturbé. L'hamiltonien total s'écrit alors

$$H = H_0 + e\mathbf{E}\cdot\mathbf{R} \tag{1.19}$$

où $-e$ est la charge de l'électron et $\mathbf{R}$ sa position. Avec l'orientation choisie, la perturbation est $\lambda V = eEZ$, Z étant la composante selon $\hat{\mathbf{z}}$ de la postition. Pour estimer α, on calcule l'effet de la perturbation sur l'état fondamental $|0, 0, 0\rangle$ – dans lequel se situe l'atome la plupart du temps – et on calcule ensuite la valeur moyenne de $\mathbf{d}$ dans cet état perturbé. L'état fondamental perturbé $|\Omega\rangle$ est, au premier ordre,

$$|\Omega\rangle = |0, 0, 0\rangle + eE \sum_{(n',l',m')\neq(0,0,0)} \frac{\langle n', l', m'|Z|0, 0, 0\rangle}{\varepsilon_{0,0} - \varepsilon_{n',l'}}|n', l', m'\rangle \tag{1.20}$$

On démontre facilement les règles de sélection suivantes :

$$\langle n', l', m'|Z|n, l, m\rangle = 0 \quad \text{sauf si} \quad m = m' \quad \text{et} \quad l = l' \pm 1 \tag{1.21}$$

Ces règles de sélection se démontrent en calculant les éléments de matrice des (anti-) commutateurs suivants :

$$\begin{aligned} &[Z, L_z] = 0 \\ &\Pi Z + Z\Pi = 0 \\ &[\mathbf{L}^2, [\mathbf{L}^2, \mathbf{R}]] = 2\hbar^2(\mathbf{R}\mathbf{L}^2 + \mathbf{L}^2\mathbf{R}) \end{aligned} \tag{1.22}$$

Par exemple,

$$\langle n', l', m'|[Z, L_z]|n, l, m\rangle = (m' - m)\hbar\langle n', l', m'|Z|n, l, m\rangle = 0 \tag{1.23}$$

[2] On néglige ici les structures fine et hyperfine de l'atome d'hydrogène.

donc $m = m'$ si $\langle n', l', m'|Z|n, l, m\rangle$ est non nul. La deuxième des relations (1.22) mène à la condition que $l + l'$ soit impair, car la parité de l'état $|n, l, m\rangle$ est $(-1)^l$. La troisième des relations (1.22) mène à la condition $l = l' \pm 1$ ou $l = l' = 0$. Ces trois conditions ensemble donnent $m = m'$ et $l = l' \pm 1$.

La somme se réduit donc à

$$|\Omega\rangle = |0, 0, 0\rangle + eE \sum_{n'} \frac{\langle n', 1, 0|Z|0, 0, 0\rangle}{\varepsilon_{0,0} - \varepsilon_{n',1}} |n', 1, 0\rangle \tag{1.24}$$

Il suffit ensuite de calculer la valeur moyenne $\langle\Omega|\mathbf{d}|\Omega\rangle$. Comme $\mathbf{d}$ est un opérateur vectoriel polaire, le terme non-perturbé s'annule et il reste

$$\langle\mathbf{d}\rangle = -2e^2 E \sum_{n'} \frac{|\langle n', 1, 0|Z|0, 0, 0\rangle|^2}{\varepsilon_{0,0} - \varepsilon_{n',1}} \tag{1.25}$$

ou

$$\alpha = 2e^2 \sum_{n'} \frac{|\langle n', 1, 0|Z|0, 0, 0\rangle|^2}{\varepsilon_{n',1} - \varepsilon_{0,0}} \tag{1.26}$$

Le calcul des éléments de matrices est, quant à lui, généralement compliqué et la somme encore plus : il faut alors procéder cas par cas.

2 Perturbations dépendant du temps

Dans cette section nous nous intéressons à des perturbations qui peuvent dépendre du temps, alors que l'hamiltonien non perturbé H_0 ne dépend pas du temps :

$$H = H_0 + V(t) \tag{2.1}$$

Nous considérerons aussi des hamiltoniens dont le spectre n'est pas nécessairement discret, mais continu ou quasi-continu. Ce qui importe ici n'est pas de trouver les nouveaux états propres de H, puisque ceux-ci ne seraient pas très utiles : H dépend du temps et ces états ne sont pas stationnaires. On veut plutôt trouver la dépendance temporelle des états, dans le but de calculer des probabilités de transitions entre les états propres de H_0 en fonction du temps.

2.1 Point de vue d'interaction

Nous avons mentionné la possibilité de décrire l'évolution temporelle selon deux points de vues : celui de Schrödinger, dans lequel les états dépendent du temps et non les opérateurs, et celui de Heisenberg, où le contraire se produit. Un troisième point de vue serait ici utile, le *point de vue de Dirac* ou *d'interaction*, dans lequel les états dépendent faiblement du temps, leur dépendance étant régie par la perturbation. Dans ce point de vue, un état $|\psi(t)\rangle_I$ et un opérateur $A_I(t)$ ont l'expression suivante en fonction des quantités correspondantes dans le point de vue de Schrödinger :

$$|\psi(t)\rangle_I = \mathrm{e}^{iH_0 t/\hbar}|\psi(t)\rangle_S \qquad A_I(t) = \mathrm{e}^{iH_0 t/\hbar} A_S \mathrm{e}^{-iH_0 t/\hbar} \tag{2.2}$$

Autrement dit, la dépendance temporelle des états est gouvernée par la perturbation V, alors que la dépendance temporelle des opérateurs est gouvernée par H_0. Dans la limite où la perturbation s'annule, ce point de vue coïncide avec celui de Heisenberg.

L'équation de Schrödinger pour la dépendance temporelle devient

$$i\hbar\partial_t \left(\mathrm{e}^{-iH_0t/\hbar}|\psi\rangle_I\right) = H_0\mathrm{e}^{-iH_0t/\hbar}|\psi\rangle_I + V_S\mathrm{e}^{-iH_0t/\hbar}|\psi\rangle_I \tag{2.3}$$

ou encore

$$\boxed{i\hbar\partial_t|\psi\rangle_I = V_I|\psi\rangle_I} \tag{2.4}$$

où maintenant la perturbation V_I est exprimée dans le point de vue d'interaction. On constate que si V est petit, la dépendance temporelle de $|\psi\rangle_I$ est faible. L'équation (2.4) peut s'intégrer formellement comme suit :

$$|\psi(t)\rangle_I = |\psi(0)\rangle_I + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t_1\ V_I(t_1)|\psi(t_1)\rangle_I \tag{2.5}$$

Encore une fois, il s'agit d'une équation implicite pour $|\psi(t)\rangle_I$ qu'on peut résoudre de manière perturbative en substituant cette expression pour $|\psi(t)\rangle_I$ dans cette même équation et en itérant. On obtient alors la *série de Dyson*:

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle_I = |\psi(0)\rangle_I &+ \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t_1\ V_I(t_1)|\psi(0)\rangle_I \\ &+ \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_0^t \mathrm{d}t_1\int_0^{t_1}\mathrm{d}t_2\ V_I(t_1)V_I(t_2)|\psi(0)\rangle_I + \\ &+ \frac{1}{(i\hbar)^3}\int_0^t \mathrm{d}t_1\int_0^{t_1}\mathrm{d}t_2\int_0^{t_2}\mathrm{d}t_3\ V_I(t_1)V_I(t_2)V_I(t_3)|\psi(0)\rangle_I + \cdots\end{aligned} \tag{2.6}$$

L'avantage du point de vue d'interaction est qu'il permet cette solution itérative de la dépendance temporelle, parce que celle-ci est contrôlée seulement par la perturbation V_I.

2.2 Règle d'or de Fermi

Supposons maintenant qu'une mesure soit effectuée à $t = 0$ et que le système se trouve alors dans l'état $|\psi(0)\rangle = |m\rangle$, l'un des états propres de H_0. Au temps $t > 0$ le système a une certaine probabilité de se trouver dans un autre état propre $|n\rangle$ de H_0 ($n \neq m$). Cette probabilité est le module carré d'une amplitude de transition

$$\langle n|\psi(t)\rangle_I = \mathrm{e}^{iE_nt/\hbar}\langle n|\psi(t)\rangle_S \tag{2.7}$$

Remarquons que la notation $|n\rangle$ désigne un état propre de H_0 à $t = 0$, sans égard à son évolution temporelle. D'autre part, la distinction entre $|\psi(t)\rangle_S$ et $|\psi(t)\rangle_I$ n'est pas importante en ce qui regarde le calcul de la probabilité de transition, car la différence entre les deux ne tient qu'à une phase. Au premier ordre en V, l'amplitude de transition est

$$\langle n|\psi(t)\rangle_I = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t_1\ \langle n|V_I(t_1)|m\rangle \tag{2.8}$$

Cependant, la perturbation V nous est a priori connue dans le point de vue de Schrödinger :

$$\langle n|V_I(t)|m\rangle = \langle n|\mathrm{e}^{iH_0t/\hbar}V_S\mathrm{e}^{-iH_0t/\hbar}|m\rangle = \mathrm{e}^{i(E_n-E_m)t/\hbar}\langle n|V_S(t)|m\rangle \tag{2.9}$$

Supposons maintenant que la perturbation est nulle pour $t < 0$, qu'elle est introduite de manière abrupte à $t = 0$ et constante par après :

$$V(t) = V_S(t) = \begin{cases} 0 & (t < 0) \\ V & (t > 0) \end{cases} \tag{2.10}$$

où V est un opérateur constant. On calcule alors que

$$\langle n|\psi(t)\rangle_I = \frac{1}{\hbar}\langle n|V|m\rangle \frac{1 - \mathrm{e}^{i\omega_{nm}t}}{\omega_{nm}} \qquad \omega_{nm} \equiv (E_n - E_m)/\hbar \tag{2.11}$$

La probabilité de transition est alors

$$P_{mn}(t) = |\langle n|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2}|\langle n|V|m\rangle|^2 \left(\frac{\sin \omega_{nm}t/2}{\omega_{nm}/2}\right)^2 \tag{2.12}$$

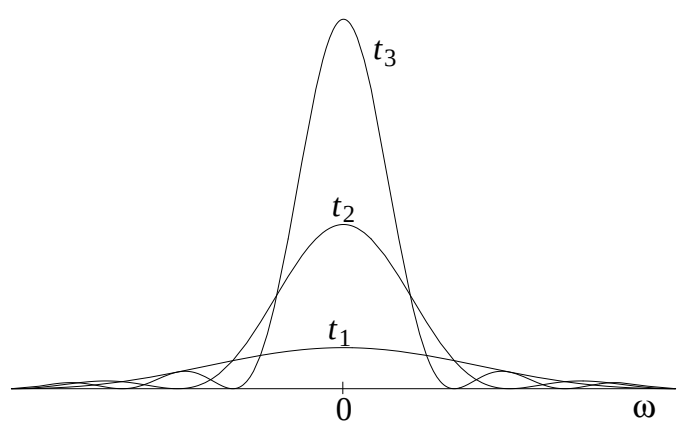


Figure 2.1. Fonction $f(\omega)$ pour trois valeurs également espacées de t: $t_1 < t_2 < t_3$.

Étudions maintenant la fonction

$$f(\omega) = \left(\frac{\sin \omega t/2}{\omega/2}\right)^2 \tag{2.13}$$

qui donne la dépendance temporelle de la probabilité de transition. Cette fonction réside principalement dans un pic central de largeur π/t et de hauteur t^2. Plus t augmente, plus cette fonction ressemble à une fonction delta. En fait, on montre que

$$\lim_{t\to\infty} \frac{1}{t}\left(\frac{\sin \omega t/2}{\omega/2}\right)^2 = 2\pi\delta(\omega) \tag{2.14}$$

Ceci résulte en partie de l'intégrale suivante :

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \ \left(\frac{\sin z}{z}\right)^2 = \pi \tag{2.15}$$

Donc, quand t est petit, la probabilté $P_{mn}(t)$ commence par croître comme t^2, jusqu'à ce que la fréquence ω_{mn} de la transition quitte le pic central de la fonction $f(\omega)$, quand $t \sim 1/\omega_{mn}$. Ensuite la probabilité décroît. Donc, plus le temps augmente, plus l'intervalle d'énergie où les transitions sont probables diminue. Si cet intervalle typique est $\Delta E = \hbar\Delta\omega$, on a la relation

$$\Delta t \Delta E \sim \hbar \tag{2.16}$$

Ici $\Delta t = t$, l'intervalle de temps entre l'application de la perturbation et le moment d'observation. Il s'agit ici de la relation d'incertitude temps-énergie. Nous verrons plus loin comment elle s'applique à la largeur de raie d'un état instable.

Supposons maintenant que le spectre de H_0 est quasi-continu et qu'on puisse donc le décrire à l'aide d'une *densité d'états* $\rho(E)$, telle que $\rho(E)\mathrm{d}E$ soit le nombre d'états compris dans un intervalle d'énergie $\mathrm{d}E$. La probabilité totale pour que le système effectue une transition de l'état $|m\rangle$ vers un état situé dans un intervalle d'énergie de largeur ΔE centré autour de E_n est

$$P_{mn}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\int_{E_n-\Delta E/2}^{E_n+\Delta E/2} \mathrm{d}E\ \rho(E)|\langle n|V|m\rangle|^2 \left(\frac{\sin(E-E_m)t/2\hbar}{(E-E_m)/2\hbar}\right)^2 \tag{2.17}$$

Quand ΔE est suffisamment petit, on est en droit de supposer que l'élément de matrice $\langle n|V|m\rangle$ et la densité $\rho(E)$ peuvent être évalués à $E = E_n$ et on écrit alors

$$P_{mn}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\rho(E_n)|\langle n|V|m\rangle|^2 \int_{E_n-\Delta E/2}^{E_n+\Delta E/2} \mathrm{d}E\ \left(\frac{\sin(E-E_m)t/2\hbar}{(E-E_m)/2\hbar}\right)^2 \tag{2.18}$$

Si t est suffisament grand ($t\Delta E > \hbar$) la plus grande partie de l'intégrant (c'est-à-dire le pic central) est incluse dans l'intervalle d'intégration et on peut remplacer les bornes d'intégration par $\pm\infty$. Étant donné l'intégrale (2.15) on peut écrire

$$P_{mn}(t) = \frac{2\pi t}{\hbar}\rho(E_n)|\langle n|V|m\rangle|^2 \equiv \Gamma_{mn} t \tag{2.19}$$

où on a défini le *taux de transition* Γ_{mn}, la probabilité de transition par unité de temps :

$$\boxed{\Gamma_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar}\rho(E_n)|\langle n|V|m\rangle|^2} \tag{2.20}$$

Cette relation constitue la *règle d'or de Fermi.*

Notons les conditions de sa validité:

1. Pour que l'approximation faite lors de l'intégration soit correcte, il faut que $t > \hbar/\Delta E$. La résolution en énergie de l'appareil de mesure détermine le temps minimum d'applicabilité.
2. L'espacement typique des niveaux δE dans le spectre quasi-continu doit être beaucoup plus petit que le pic central, pour que l'intégrale ait un sens : $t \ll \hbar/\delta E$.
3. Il s'agit d'un résultat obtenu au premier ordre dans la théorie des perturbations. Il faut donc que $|\langle n|V|m\rangle|^2$ soit petit, ou encore que $P_{mn}(t) \ll 1$.

Une façon plus formelle d'obtenir la règle d'or consiste à écrire, dans la limite t grand,

$$\left(\frac{\sin(E_n-E_m)t/2\hbar}{(E_n-E_m)/2\hbar}\right)^2 \to 2\pi\hbar t\delta(E_n-E_m) \tag{2.21}$$

Le taux de transition est alors simplement

$$\boxed{\Gamma_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle n|V|m\rangle|^2\delta(E_n - E_m)} \tag{2.22}$$

La densité d'états ρ est simplement remplacée par la fonction delta. Cependant, cette relation n'est applicable en pratique que si on somme le taux de transition sur un ensemble d'états finaux proches les uns des autres. C'est cependant sous cette forme qu'on retiendra la règle d'or, en raison de sa plus grande versatilité.

Remarquons que la conservation de l'énergie d'exprime d'une façon particulière dans la règle d'or (2.22), par une fonction delta. Les autres lois de conservation présentes dans le système (impulsion, moment cinétique, parité, etc.) se manifestent dans l'élément de matrice $\langle n|V|m\rangle$, par des règles de sélection. Ainsi, une transition peut être compatible avec la conservation de l'énergie, mais interdite par les règles de sélection et vice-versa.

2.3 Perturbation adiabatique

Dans la démonstration de la règle d'or, nous avons supposé que la pertubation $V(t)$ était nulle pour $t < 0$ et constante pour $t > 0$. L'interaction apparait donc de manière abrupte dans le système. En réalité, une interaction controlée par l'expérimentateur n'apparait pas de façon abrupte, mais est mise en place sur une certaine échelle de temps. Pour démontrer la validité de la règle d'or même dans ces cas, nous allons la redémontrer, mais cette fois en supposant que la perturbation $V(t)$ a la forme suivante : $V(t) = \mathrm{e}^{\eta t}V$, où V est un opérateur constant et η un nombre infinitésimal positif. L'interaction est alors introduite de façon *adiabatique*, c'est-à-dire arbitrairement lentement.

Si on définit la fréquence de transition $\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar$, l'amplitude de transition au temps t est alors

$$\begin{aligned}\langle n|\psi(t)\rangle_I &= \frac{1}{i\hbar}\langle n|V|m\rangle \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \ \exp -i(\omega_{mn}t_1 + i\eta t_1) \\ &= \frac{1}{\hbar}\langle n|V|m\rangle \frac{\exp -i(\omega_{mn}t + i\eta t)}{\omega_{mn} + i\eta}\end{aligned} \tag{2.23}$$

Nous avons supposé que $t_0 \to -\infty$. La probabilité de transition est

$$P_{mn}(t) = \frac{1}{\hbar^2}|\langle n|V|m\rangle|^2 \mathrm{e}^{2\eta t}\frac{1}{\omega_{mn}^2 + \eta^2} \tag{2.24}$$

Le taux de transition est la dérivée par rapport à t:

$$\Gamma_{mn} = \frac{2}{\hbar^2}|\langle n|V|m\rangle|^2 \mathrm{e}^{2\eta t}\frac{\eta}{\omega_{mn}^2 + \eta^2} \tag{2.25}$$

Maintenant, prenons la limite $\eta \to 0$. Encore une fois, nous avons une représentation de la fonction delta :

$$\lim_{\eta\to 0}\frac{\eta}{z^2 + \eta^2} = \pi\delta(z) \tag{2.26}$$

On obtient alors la règle d'or :

$$\Gamma_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle n|V|m\rangle|^2\delta(E_m - E_n) \tag{2.27}$$

(notons que $\delta(\omega) = \hbar\delta(E)$, si $E = \hbar\omega$). Ce résultat pour le taux de transition coïncide avec celui obtenu pour une perturbation abrupte. On constate donc que la façon dont la perturbation est introduite n'affecte pas Γ_{mn}.

2.4 Processus de désintégration

Considérons un noyau dans un état nucléaire initial instable $|i\rangle$ qui, sous l'influence d'une interaction, se désintègre progressivement vers un état nucléaire plus stable $|f\rangle$ tout en émettant une particule de masse m (neutron, particule α, etc.). L'état final complet doit donc être écrit $|f, \mathbf{k}\rangle$, où $\mathbf{k}$ est le vecteur d'onde de la particule émise. Supposons que l'élément de matrice $\langle f, \mathbf{k}|V|i\rangle$ qui permet cette transition nous soit connu.[1] Si E_i et $E_f < E_i$ sont les niveaux d'énergie du noyau pour les états initial et final, la conservation de l'énergie s'écrit donc

$$E_i = E_f + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \tag{2.28}$$

Nous voulons connaître le nombre de désintégrations par unité de temps pour lesquelles la radiation est émise dans un angle solide $\mathrm{d}\Omega$. Pour cela il faut connaître le nombre d'états quantiques (le nombre de vecteurs d'onde possibles) compris dans cet angle solide. Rappelons qu'en dimension 1 le nombre de modes d'oscillations compris dans un intervalle $\mathrm{d}k_x$ de nombre d'onde est $L\mathrm{d}k_x/2\pi$, où L est la longueur du système. En dimension 3, on écrit de même

$$\text{nombre d'états} \quad = \frac{L^3}{(2\pi)^3}\mathrm{d}^3k = \frac{L^3}{(2\pi)^3}k^2\mathrm{d}k\mathrm{d}\Omega \tag{2.29}$$

Comme $\mathrm{d}E = \hbar^2 k\mathrm{d}k/m$, on peut donc écrire la règle d'or sous la forme suivante :

$$\mathrm{d}\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{L^3}{(2\pi)^3}\frac{mk}{\hbar^2}\mathrm{d}\Omega|\langle f, \mathbf{k}|V|i\rangle|^2\delta(E(\mathbf{k}) + E_f - E_i)\mathrm{d}E \tag{2.30}$$

On somme ensuite sur les différents états finaux pour lesquels le vecteur d'onde $\mathbf{k}$ est compris dans un angle solide $\mathrm{d}\Omega$; ceci revient à intégrer sur les énergies dans l'équation précédente : [2]

$$\frac{\mathrm{d}\Gamma}{\mathrm{d}\Omega} = L^3|\langle f, \mathbf{k}|V|i\rangle|^2\frac{mk}{(2\pi)^2\hbar^3} \tag{2.31}$$

On peut aussi calculer le taux de désintégration total, en sommant sur tous les états finaux possibles :

$$\Gamma = \int \mathrm{d}\Omega\ \frac{\mathrm{d}\Gamma}{\mathrm{d}\Omega} \tag{2.32}$$

Supposons qu'on mesure l'état d'un noyau au temps $t = 0$ pour le trouver dans l'état $|i\rangle$. La probabilité pour que le noyau soit encore dans son état initial après un temps t est donc $P(t) = 1 - \Gamma t$. Cependant, ce résultat n'est valide, rappelons-le, que si $\Gamma t \ll 1$, c'est-à-dire pour des temps suffisamment courts. Pour des temps plus longs, il faut composer les probabilités, en supposant bien sûr qu'aucun processus ne repeuple l'état $|i\rangle$. On divise donc le temps t en N intervalles t/N.

[1] L'interaction V se trouve à changer le nombre de particules dans le système. Nous verrons au prochain chapitre comment décrire de telles interactions.

[2] Ce taux ne dépend pas en fait du volume, car on a supposé dans cette démonstration que les états étaient normalisés : pour que l'état $|f, \mathbf{k}\rangle$ soit normalisé dans une boîte de côté L, il doit contenir un facteur $L^{-3/2}$. Le calcul de l'élément de matrice fera donc apparaître un facteur de L^{-3} qui donnera un taux de désintégration par noyau qui ne dépend pas du volume.

La probabilité $P(t)$ que le noyau soit encore dans l'état $|i\rangle$ après N périodes de t/N est le produit des probabilités que cet état survive à chacune des périodes :

$$P(t) = \lim_{N\to\infty} (1 - \Gamma t/N)^N = \exp -\Gamma t \tag{2.33}$$

Pour un ensemble de noyaux, ceci signifie que la population de l'état $|i\rangle$ diminue exponentiellement, avec une constante de temps $\tau = 1/\Gamma$ qu'on appelle la *demi-vie* de l'état.

Par exemple, l'isotope radioactif ^{14}C se désintègre par conversion d'un neutron en un proton et un électron. Sa demi-vie est de 5568 ans. S'il n'existait pas de processus de repopulation de l'état initial cet isotope ne serait plus observable! En réalité le processus de transition inverse par lequel un électron est absorbé par un noyau d'azote (^{14}N) existe, mais seuls les rayons cosmiques peuvent produire des électrons suffisamment énergétiques pour cette réaction. Cette réaction n'a donc lieu que dans la haute atmosphère. L'isotope ^{14}C est ensuite diffusé dans toute l'atmosphère. Le taux de réaction inverse dépend bien sûr du flux des électrons à la bonne énergie, et c'est la valeur de ce taux relative à Γ qui détermine l'abondance du ^{14}C à l'air libre. La méthode de datation bien connue repose sur le principe que seul les êtres vivants peuvent absorber l'isotope ^{14}C puisqu'il n'existe que dans l'atmosphère. Il y a donc chez les êtres vivants une certaine proportion de ^{14}C et cette proportion diminue lentement dès que ces êtres n'absorbent plus l'air ambiant, c'est-à-dire après la mort.

2.5 Perturbations harmoniques

Au lieu de considérer une perturbation essentiellement constante, étudions ici le cas d'une perturbation harmonique dans le temps :

$$V(t) = V\mathrm{e}^{\eta t}\cos(\omega t) \tag{2.34}$$

où V est un opérateur constant. L'amplitude de transition est alors

$$\langle n|\psi(t)\rangle_I = \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{2}\langle n|V|m\rangle \left(\frac{\mathrm{e}^{-i(\omega_{mn}-\omega+i\eta)t}}{\omega_{mn}-\omega+i\eta} + \frac{\mathrm{e}^{-i(\omega_{mn}+\omega+i\eta)t}}{\omega_{mn}+\omega+i\eta}\right) \tag{2.35}$$

La probabilité est alors la somme de deux termes indépendants, plus deux termes d'interférence :

$$\begin{aligned} P_{mn}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\frac{1}{4}|\langle n|V|m\rangle|^2\mathrm{e}^{2\eta t}\Bigg\{ &\frac{1}{(\omega_{mn}-\omega)^2+\eta^2} + \frac{1}{(\omega_{mn}+\omega)^2+\eta^2} \\ &+ 2\mathrm{Re}\,\frac{\mathrm{e}^{-2i\omega t}}{(\omega_{mn}-\omega-i\eta)(\omega_{mn}+\omega+i\eta)}\Bigg\} \end{aligned} \tag{2.36}$$

On constate facilement que la moyenne temporelle de cette expression fait disparaître le terme d'interférence. Dans la limite $\eta \to 0$ il ne reste donc que les deux premiers termes, qui ont chacun la même forme que précédemment. On peut donc écrire directement

$$\boxed{\Gamma_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar^2}\frac{1}{4}|\langle n|V|m\rangle|^2\left\{\delta(\omega_{mn}-\omega) + \delta(\omega_{mn}+\omega)\right\}} \tag{2.37}$$

Les deux termes représentent deux processus différents. On suppose par convention que $\omega > 0$ (fréquence positive). Le premier terme s'applique si $\omega_{mn} > 0$, c'est-à-dire si $E_m > E_n$. Dans ce cas il s'agit d'un processus d'*émission* par lequel le système émet un quanta d'énergie. Le deuxième terme s'applique si $\omega_{mn} < 0$, c'est-à-dire si $E_m < E_n$. Il s'agit d'un processus d'*absorption* par lequel le système reçoit un quantum d'énergie.

2.6 Transitions du deuxième ordre

Il arrive que l'élément de matrice $\langle n|V|m\rangle$ s'annule. Dans ce cas il faut avoir recours au terme en V^2 de la série de Dyson. En supposant une perturbation constante introduite de façon adiabatique, l'amplitude de transition est alors

$$\begin{aligned}
\langle n|\psi(t)\rangle_I &= \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{-\infty}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{-\infty}^{t_1}\mathrm{d}t_2\ \langle n|V_I(t_1)V_I(t_2)|m\rangle \\
&= -\frac{1}{\hbar^2}\sum_k\int_{-\infty}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{-\infty}^{t_1}\mathrm{d}t_2\ \langle n|V_I(t_1)|k\rangle\ \langle k|V_I(t_2)|m\rangle \\
&= -\frac{1}{\hbar^2}\sum_k\int_{-\infty}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{-\infty}^{t_1}\mathrm{d}t_2\ \mathrm{e}^{-i(\omega_{kn}+i\eta)t_1}\mathrm{e}^{-i(\omega_{mk}+i\eta)t_2}\ \langle n|V|k\rangle\langle k|V|m\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar^2}\mathrm{e}^{-i\omega_{mn}t}\frac{\mathrm{e}^{2\eta t}}{\omega_{mn}+2i\eta}\sum_k\frac{\langle n|V|k\rangle\langle k|V|m\rangle}{\omega_{mk}+i\eta}
\end{aligned} \tag{2.38}$$

La probabilité de transition est obtenue en calculant le module carré de cette expression et le taux de transition Γ en prenant la dérivée par rapport au temps; on obtient

$$\boxed{\Gamma_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle n|V|m\rangle + \sum_k\frac{\langle n|V|k\rangle\langle k|V|m\rangle}{\hbar(\omega_{mk}+i\eta)}\right|^2\delta(E_n-E_m)} \tag{2.39}$$

où nous avons ajouté la contribution du premier ordre, dans le cas où elle n'est pas nulle. Le facteur $i\eta$ est très important, même si la limite $\eta\to 0$ est prise à la fin. En effet, si le spectre est continu ou quasi-continu, la somme devient une intégrale et ce facteur nous donne une prescription d'intégration dans le plan complexe proche de la singularité $\omega_{mk}=0$.

3 Diffusion

Dans cette section nous allons étudier le problème de la diffusion d'une particule par un potentiel. La particule incidente est un état propre de l'impulsion (une onde plane) avec vecteur d'onde $\mathbf{k}=k\hat{\mathbf{z}}$. Nous déterminerons alors la probabilité pour cette particule de se retrouver dans un état de vecteur d'onde $\mathbf{q}$ quand un potentiel $V(\mathbf{r})$ est introduit. Cette probabilité est directement reliée à la section efficace de diffusion.

3.1 Équation intégrale de la diffusion

Écrivons l'hamiltonien sous la forme suivante :

$$H = H_0 + V(\mathbf{r}) \qquad H_0 = \frac{P^2}{2m} \tag{3.1}$$

L'hamiltonien non perturbé possède un spectre continu de valeurs propres. Pour rester général, désignons par $|\phi\rangle$ un état non perturbé d'énergie E (il y en a une infinité, en raison de la dégénérescence) et par $|\psi\rangle$ l'état propre de H qui tend vers $|\phi\rangle$ quand $V\to 0$:

$$H_0|\phi\rangle = E|\phi\rangle \qquad (E-H_0)|\psi\rangle = V|\psi\rangle \tag{3.2}$$

On peut écrire la solution formelle suivante :

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0} V|\psi\rangle \tag{3.3}$$

Cependant, l'opérateur $(E - H_0)^{-1}$ est mal défini : son action sur les états propres de H_0 avec énergie E est singulière. En général, on définit la *résolvente*

$$G(z) = \frac{1}{z - H} \qquad z \in \mathbb{C} \tag{3.4}$$

et $G(z)$ est analytique partout sauf aux points de l'axe réel correspondant aux valeurs propres de H_0. Pour donner un sens à la relation (3.3), on doit donc remplacer E par un point du plan complexe placé tout juste à côté de l'axe réel :

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} V|\psi\rangle \qquad (\varepsilon \to 0) \tag{3.5}$$

Il s'agit de l'équation de *Lippmann-Schwinger*. Nous verrons plus loin quelle est l'implication du signe $\pm$. Il s'agit bien sûr d'une équation implicite pour $|\psi\rangle$, mais qu'on peut itérer de manière perturbative, de la façon suivante :

$$\begin{aligned} |\psi\rangle = |\phi\rangle &+ \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} V|\phi\rangle \\ &+ \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} V \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} V|\phi\rangle + \cdots \end{aligned} \tag{3.6}$$

Écrivons encore une fois l'équation (3.5), mais cette fois en projetant sur les états propres de la position, c'est-à-dire en travaillant avec les fonctions d'ondes :

$$\langle \mathbf{r}|\psi\rangle = \langle \mathbf{r}|\phi\rangle + \int \mathrm{d}^3 r' \; \langle \mathbf{r}| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} |\mathbf{r}'\rangle \langle \mathbf{r}'|V|\psi\rangle \tag{3.7}$$

(nous avons inséré une relation de complétude). L'élément de matrice de $(E - H_0 \pm i\varepsilon)^{-1}$ dans la base des positions est sa *fonction de Green*:

$$\begin{aligned} G_\pm(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &\equiv \langle \mathbf{r}| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} |\mathbf{r}'\rangle \\ &= \int (\mathrm{d}^3 p) \; \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle \frac{1}{E - \hbar^2 p^2/2m \pm i\varepsilon} \langle \mathbf{p}|\mathbf{r}'\rangle \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \int (\mathrm{d}^3 p) \; \mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \frac{1}{k^2 - p^2 \pm i\varepsilon} \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty \frac{p^2 \mathrm{d}p}{(2\pi)^3} \int_{-1}^1 \mathrm{d}(\cos\theta) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \; \frac{\mathrm{e}^{ipR\cos\theta}}{k^2 - p^2 \pm i\varepsilon} \end{aligned} \tag{3.8}$$

où $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ et où θ est l'angle entre $\mathbf{p}$ et $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Après intégration sur θ, on trouve

$$G_\pm(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2 R} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^\infty p \mathrm{d}p \; \frac{\mathrm{e}^{ipR} - \mathrm{e}^{-ipR}}{p^2 - k^2 \mp i\varepsilon} \tag{3.9}$$

L'intégrale se fait par la méthode des résidus. Par exemple, dans le cas du signe supérieur, on ferme le contour vers le haut pour le premier terme de la fraction et vers le bas pour le deuxième terme. On trouve finalement

$$G_{\pm}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi}\frac{\mathrm{e}^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{3.10}$$

D'autre part, si la perturbation V n'est qu'un simple potentiel indépendant du spin, on a $\langle \mathbf{r}'|V|\psi\rangle = V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')$. L'équation (3.7) peut donc s'écrire comme suit :

$$\psi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) - \frac{2m}{\hbar^2}\int \mathrm{d}^3r' \; \frac{1}{4\pi}\frac{\mathrm{e}^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') \tag{3.11}$$

L'interprétation de cette formule est claire : chaque point $\mathbf{r}'$ émet une onde radiale dont l'amplitude est proportionnelle au potentiel et à la fonction d'onde exacte. La superposition de toutes ces ondes donne la partie diffusée de la fonction d'onde. Le choix du signe devient évident : le signe $+$ représente une onde sortante et le signe $-$ une onde rentrante. Les conditions aux limites correspondant à la diffusion d'une onde plane par le potentiel mènent au signe positif.

Supposons maintenant que le potentiel $V(\mathbf{r}')$ est assez bien localisé, c'est-à-dire qu'il diminue rapidement lorsqu'on s'éloigne de l'origine. La contribution principale à la diffusion provient alors des points $\mathbf{r}'$ tels que $|\mathbf{r}'| \ll |\mathbf{r}|$, $\mathbf{r}$ étant un point d'observation suffisamment éloigné. On procède alors aux approximations suivantes :

$$|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \approx r - \mathbf{n}\cdot\mathbf{r}' \quad \text{et} \quad \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \approx \frac{1}{r} \tag{3.12}$$

La relation (3.11) s'écrit alors

$$\psi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) - \frac{2m}{\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r}\int \mathrm{d}^3r' \; \frac{1}{4\pi}\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'}V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') \tag{3.13}$$

où $\mathbf{q}$ est le vecteur de grandeur k dirigé vers le point d'observation $\mathbf{r}$. Comme l'onde incidente est plane et de vecteur d'onde $\mathbf{k}$, on écrit finalement

$$\boxed{\begin{aligned} &\psi(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r}f(\mathbf{q}) \qquad \text{où} \\ &f(\mathbf{q}) = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{d}^3r' \; \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'}V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') \end{aligned}} \tag{3.14}$$

Il s'agit d'une équation intégrale pour la fonction d'onde ψ. Le premier terme est la fonction d'onde incidente et le deuxième la fonction d'onde diffusée.

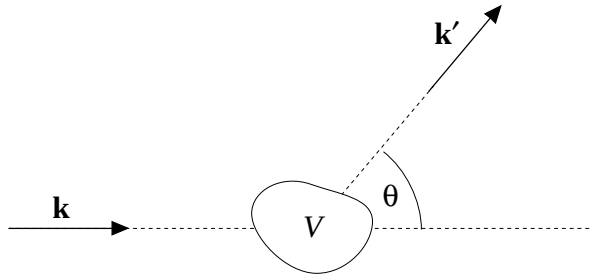


Figure 3.1. Schéma du processus de diffusion : l'onde plane incidente de vecteur d'onde $\mathbf{k}$, l'onde diffusée de vecteur d'onde $\mathbf{q}$ et le potentiel diffuseur.

Approximation de Born
L'équation (3.14) peut être résolue en première approximation en substituant $\psi \to \phi$ dans le deuxième terme. Il s'agit de l'*approximation de Born*, qui est d'autant plus valable que la diffusion est faible (c'est-à-dire si la différence entre ϕ et ψ petite). On écrit alors

$$\begin{aligned} f(\mathbf{q}) &= \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{d}^3r' \ \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'}V(\mathbf{r}')\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} \\ &= \frac{m}{2\pi\hbar^2}\tilde{V}(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \end{aligned} \tag{3.15}$$

où $\tilde{V}$ est la transformée de Fourier du potentiel. C'est cette transformée, évaluée au transfert d'impulsion $\mathbf{q}-\mathbf{k}$, qui détermine donc l'amplitude de diffusion.

3.2 Section efficace

On définit la *section différentielle de diffusion* $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$ comme le courant de particules diffusé par angle solide, divisé par le courant incident. En d'autres termes, $\mathrm{d}\sigma$ est le nombre de particules diffusées à travers l'angle solide $\mathrm{d}\Omega$ par unité de temps, par rapport au nombre de particules incidentes par unité de surface et unité de temps.

On sait que le courant incident associé à la fonction d'onde $\phi(x) = \exp i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}$ a la forme suivante :

$$\mathbf{J}_{\text{in.}} = \frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}\ \ (\phi\nabla\phi^*) = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m} \tag{3.16}$$

Le courant diffusé dans la direction radiale est, lui, donné par

$$\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}_{\text{diff.}} = \frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}\ \ (\psi\frac{\partial}{\partial r}\psi^*) = \frac{\hbar}{mr^2}k|f(\mathbf{q})|^2 \tag{3.17}$$

Pour obtenir le courant diffusé par unité d'angle solide on doit simplement multiplier par r^2. La section différentielle est donc

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |f(\mathbf{q})|^2} \tag{3.18}$$

Dans l'approximation de Born, la section différentielle a l'expression suivante :

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2|\tilde{V}(\mathbf{q}-\mathbf{k})|^2} \tag{3.19}$$

La *section efficace* est alors l'intégrale sur les angles de la section différentielle et donne le nombre de particules diffusées par unité de temps, divisé par le nombre de particules incidentes par unité de temps et de surface :

$$\sigma = \int \mathrm{d}\Omega\ \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} \tag{3.20}$$

La section efficace a les dimensions d'une surface et dépend en général de l'énergie des particules incidentes.

3.3 Section efficace et règle d'or de Fermi

On peut aussi discuter du problème de diffusion sans faire référence à la théorie formelle présentée ci-haut, mais en utilisant la théorie des perturbations dépendant du temps. Dans ce cas, l'état initial est une onde plane $|\mathbf{k}\rangle$ et l'état final une autre onde plane $|\mathbf{q}\rangle$. Le premier ordre de la théorie des perturbations (la règle d'or) est équivalent à l'approximation de Born citée plus haut. L'amplitude de transition entre l'onde incidente $|\mathbf{k}\rangle$ et l'onde diffusée $|\mathbf{q}\rangle$ est donnée par

$$\Gamma(\mathbf{k} \to \mathbf{q}) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{q}|V|\mathbf{k}\rangle|^2 \delta(E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{q})) \tag{3.21}$$

L'élément de matrice est proportionnel à la transformée de Fourier du potentiel :

$$\langle \mathbf{q}|V|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{L^3} \int \mathrm{d}^3 r \; \mathrm{e}^{i\mathbf{r}\cdot(\mathbf{k}-\mathbf{q})} V(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^3} \tilde{V}(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \tag{3.22}$$

(nous avons placé le système dans une boîte de longueur L, de sorte que les états $|\mathbf{k}\rangle$ et $|\mathbf{q}\rangle$ sont normalisés). Sommons maintenant cette amplitude sur les états diffusés contenus dans l'élément de volume $\mathrm{d}^3 q$. Le nombre d'états contenus dans cet élément de volume est

$$\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \mathrm{d}^3 q = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 q^2 \mathrm{d}q \mathrm{d}\Omega \tag{3.23}$$

Cependant, comme $E(\mathbf{q}) = \hbar^2 q^2/2m$, on a $\mathrm{d}E = (\hbar^2 q/m) dq$ et ce nombre d'états par élément de volume de l'espace des impulsions devient

$$\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{m}{\hbar^2} q \mathrm{d}\Omega \mathrm{d}E \tag{3.24}$$

En multipliant (3.21) par ce résultat et en intégrant sur E, il reste le nombre de transitions par unité de temps et d'angle solide, pour une seule particule incidente :

$$\frac{\mathrm{d}\Gamma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{mk}{\hbar^3 (2\pi)^2} |\tilde{V}(\mathbf{q} - \mathbf{k})|^2 L^{-3} \tag{3.25}$$

Pour obtenir la section différentielle, il faut diviser ce taux non pas par le nombre de particules dans la boîte (ici 1), mais par leur densité de courant $\hbar k/mL^3$ (il s'agit de la vitesse des particules incidentes fois leur nombre par unité de volume, ici $1/L^3$). On retrouve alors l'expression (3.19):

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |\tilde{V}(\mathbf{q} - \mathbf{k})|^2 \tag{3.26}$$

3.4 Diffusion de Coulomb

Comme exemple considérons la diffusion de particules chargées (des électrons) sur une charge fixe (un noyau lourd). Le potentiel diffuseur est

$$V(r) = \frac{Ze^2}{r} \to \tilde{V}(\mathbf{q}) = Ze^2 \int \mathrm{d}^3 r \; \frac{\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{r} \tag{3.27}$$

Calculons cette transformée de Fourier :

$$\begin{aligned} \tilde{V}(\mathbf{q}) &= Ze^2 2\pi \int_0^\infty \mathrm{d}r \; r^2 \int_{-1}^1 \mathrm{d}z \; \frac{\mathrm{e}^{-iqzr}}{r} \qquad (z = \cos\theta) \\ &= \frac{4\pi Ze^2}{q} \int_0^\infty \mathrm{d}r \; \sin qr \end{aligned} \tag{3.28}$$

Malheureusement, cette dernière intégrale est mal définie. Ce problème est lié au fait que le potentiel de Coulomb a un rayon d'action infini et que sa section efficace est, strictement parlant, infinie.

Pour remédier à cette situation, modifions le potentiel de Coulomb pour lui donner un rayon d'action fini commme le potentiel de Yukawa :

$$\frac{Ze^2}{r} \to Ze^2 \frac{\mathrm{e}^{-\mu r}}{r} \tag{3.29}$$

Ici μ^{-1} est une longueur caractéristique. Sa transformée de Fourier est alors

$$\tilde{V}(\mathbf{q}) = \frac{4\pi Ze^2}{q} \int_0^\infty \mathrm{d}r \; \mathrm{e}^{-\mu r} \sin qr = \frac{4\pi Ze^2}{q^2 + \mu^2} \tag{3.30}$$

On peut ensuite prendre la limite $\mu \to 0$ pour trouver

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{2mZe^2}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{q}|^4} \tag{3.31}$$

En prenant $\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{z}}$ et $\mathbf{q} = k\mathbf{n}$ on calcule que

$$(\mathbf{k} - \mathbf{q})^2 = k^2(2 - 2\cos\theta) = 4k^2 \sin^2\theta/2 \tag{3.32}$$

Étant donné que $E = \hbar^2 k^2/2m$, on peut écrire

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{Z^2 e^4}{16E^2} \frac{1}{\sin^4\theta/2}} \tag{3.33}$$

Il s'agit de la section différentielle de Rutherford. La diffusion est maximale quand l'angle est faible. De plus, on constate que la section efficace σ est infinie, ce qui est encore dû au rayon d'action infini du potentiel de Coulomb : même si la charge est arbitrairement éloignée du centre diffuseur, elle est encore suffisamment déviée pour contribuer à σ. Cela se voit par la prédominance dans $d\sigma/\mathrm{d}\Omega$ des faibles angles de diffusion. En réalité, le potentiel de Coulomb est écranté par d'autres charges et son rayon d'action effectif est fini, ce qui justifie physiquement le passage par le potentiel de Yukawa.

Problème 3.1 *Niveaux de vibration et oscillateur anharmonique*

Une molécule diatomique possède, en plus des degrés de liberté internes de chacun des deux atomes, des degrés de liberté de rotation et de vibration. Dans l'approximation adiabatique, on suppose que les électrons sont si rapides en comparaison des noyaux, que le moindre déplacement de ces derniers produit un réarrangement instantané des premiers, ce qui nous permet de considérer un potentiel $V(r)$ décrivant l'énergie associée à la séparation r entre les deux atomes. La distance moyenne r_0 est alors donnée par la moyenne de r dans l'état fondamental associé à ce potentiel (nous ignorons ici les degrés de liberté de rotation et de translation, qui se découplent de celui de vibration). Le potentiel $V(r)$ peut toujours être développé en série de Taylor autour de sa valeur minimum; le premier terme non constant correspond à un oscillateur harmonique, et le second à une correction anharmonique (cubique en r). On peut donc décrire la vibration de la molécule par l'hamiltonien suivant, en première approximation :

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 + \sigma\hbar\omega \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/2} X^3$$

La forme du terme anharmonique a été choisie de façon à ce que σ soit un nombre sans unités. La masse m est ici la masse réduite des deux atomes, et $X = r - r_0$.

a) Obtenez une expression explicite pour les niveaux d'énergie E_n et les états stationnaires $|\psi_n\rangle$ de ce système, à l'ordre σ^2 pour E_n et l'ordre σ pour $|\psi_n\rangle$. Obtenez aussi une équation implicite simple pour $\delta_0 = (E_0/\hbar\omega - \frac{1}{2})$ à partir de la série de Brillouin-Wigner à l'ordre σ^2.

b) Si la molécule est polaire (les deux atomes sont alors différents) elle aura un moment dipolaire électrique d proportionnel à X: $d = \alpha X$. Écrivez l'hamiltonien décrivant l'interaction de la molécule avec une onde électromagnétique incidente de fréquence Ω et d'amplitude E à polarisation linéaire (on peut supposer que le dipôle s'aligne avec le champ électrique).

c) Supposons que σ est assez petit pour qu'on puisse le négliger en première approximation. Les états vibrationnels de la molécule sont alors ceux de l'oscillateur harmonique, notés $|n\rangle$. Donnez une expression pour le taux de transition Γ_{mn} de l'état $|m\rangle$ vers l'état $|n\rangle$ dû à l'onde électromagnétique, au premier ordre dans la théorie des perturbations. Quelles sont les seules transitions permises?

d) Refaites le même calcul, pour le taux $\Gamma_{mn} : |\psi_m\rangle \to |\psi_n\rangle$, en utilisant l'expression approximative obtenue pour $|\psi_n\rangle$. Y a-t-il d'autres transitions permises au premier ordre en E ?

Problème 3.2 *Polarisabilité d'une molécule polaire*

Une molécule diatomique possède un moment dipolaire permanent d parallèle à l'axe de la molécule. Soit I le moment d'inertie de la molécule par rapport aux deux autres axes. L'hamiltonien décrivant le mouvement de rotation de la molécule diatomique est

$$H = \frac{1}{2I}\mathbf{J}^2$$

où $\mathbf{J}$ est l'opérateur du moment cinétique de la molécule par rapport au centre de masse de la molécule, dans un repère fixe dans l'espace. Un champ électrique est appliqué parallèlement à l'axe z et la perturbation induite est $V = -Ed\cos\theta$, où θ est l'angle polaire entre l'axe de la molécule et l'axe z.

a) Quelles sont les fonctions propres décrivant les états de rotation de la molécule, en fonction des coordonnées angulaires θ et φ de l'axe de la molécule?

b) Calculez la polarisabilité α de cette molécule dans son état fondamental. On néglige bien sûr la contribution électronique à cette polarisabilité et on suppose que la température est suffisamment basse pour ne tenir compte que du fondamental. Effectuez le calcul au premier ordre non trivial en théorie des perturbations. Résultat :

$$\alpha = \frac{4I\mathrm{d}^2}{3\hbar^2}$$

Problème 3.3 *Diffusion par une sphère dure*

Considérez la diffusion de particules de masse m sur un potentiel diffuseur à symétrie sphérique $V(r)$ défini comme suit :

$$V(r) = \begin{cases} V & (r \leq a) \\ 0 & (r > a) \end{cases}$$

Calculez la section différentielle de diffusion dans l'approximation de Born. Écrivez la section efficace σ dans la limite de faible énergie.

Problème 3.4 *Effet d'une impulsion sur un oscillateur*

Un oscillateur harmonique chargé est soumis à une impulsion électrique de forme gaussienne :

$$E(t) = E_0 \mathrm{e}^{-(t/\tau)^2} \cos \omega t$$

La perturbation $V(t)$ est $-eE(t)X$, où X est l'opérateur position de l'ocillateur harmonique.

a) Calculez la probabilité que l'oscillateur passe de l'état $|m\rangle$ à $t = -\infty$ à l'état $|n\rangle$ à $t = +\infty$, au premier ordre en théorie des perturbations. Quelles sont les transitions permises?

b) Discutez des limites $\tau \ll \omega^{-1}$ et $\tau \gg \omega^{-1}$.

Problème 3.5 *Diffusion au deuxième ordre*

Une particule est diffusée par un potentiel central $V(r)$ de forme gaussienne :

$$V(r) = V_0 \exp -\frac{r^2}{R^2}$$

a) Calculez la section différentielle de diffusion dans l'approximation de Born (premier ordre dans la théorie des perturbations).

b) Calculez la contribution au deuxième ordre dans la théorie des perturbations à l'amplitude de diffusion. En fait, donnez une expression intégrale pour cette contribution et évaluez-la approximativement dans le régime de grand transfert d'impulsion $qR \gg 1$, où $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ est la différence entre le vecteur d'onde incident $\mathbf{k}$ et le vecteur d'onde $\mathbf{k}'$ de la particule diffusée.

c) En comparant cette contribution à l'amplitude obtenue au premier ordre dans le même régime, que concluez-vous sur la validité de l'approximation de Born dans ce régime? Justifiez.

Problème 3.6 *Diffusion de neutrons*

Nous nous intéressons ici à la diffusion de neutrons sur des électrons liés. Appelons $\boldsymbol{\mu}_e$ et $\boldsymbol{\mu}_n$ les moments magnétiques de l'électron et du neutron respectivement. En fonction des spins , on a

$$\boldsymbol{\mu}_e = -\frac{e}{m_e c}\mathbf{S}_e \qquad \boldsymbol{\mu}_n = \frac{ge}{m_n c}\mathbf{S}_n \quad (g \approx -1.91)$$

L'hamiltonien d'interaction est $H = -\boldsymbol{\mu}_e \cdot \mathbf{B}_n$, où $\mathbf{B}_n$ est le champ magnétique produit par le moment magnétique du neutron :

$$\mathbf{B}_n = \nabla \wedge \left(\frac{\boldsymbol{\mu}_n \wedge \mathbf{r}}{r^3}\right)$$

a) Montrez que l'hamiltonien d'interaction peut s'écrire sous la forme suivante :

$$H = -4\pi \boldsymbol{\mu}_e \cdot \boldsymbol{\mu}_n \delta(\mathbf{r}) - (\boldsymbol{\mu}_e \cdot \nabla)(\boldsymbol{\mu}_n \cdot \nabla)\frac{1}{r}$$

Prenons comme état initial une onde plane de vecteur d'onde $\mathbf{p}_1$ pour le neutron, avec orientation de spin α_1 ($\alpha_1 = \uparrow$ ou $\downarrow$), et un état atomique de fonction d'onde $\phi(\mathbf{r})$ pour l'électron, avec orientation de spin β_1. Comme état final, prenons le même type d'état, avec $\mathbf{p}_2$, α_2 et β_2 (on suppose que l'état atomique de l'électron est le même). On écrit donc

$$|i\rangle = |\mathbf{p}_1, \phi, \alpha_1, \beta_1\rangle \qquad |f\rangle = |\mathbf{p}_2, \phi, \alpha_2, \beta_2\rangle$$

Appelons $\mathbf{r}_e$ la position de l'électron, $\mathbf{r}_n$ celle du neutron, et définissons $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_n$.
b) Montrez que l'élément de matrice $\langle f|H|i\rangle$ est donnée par

$$\frac{4\pi F(\mathbf{q})}{V}\langle\alpha_2,\beta_2|((\boldsymbol{\mu}_e\cdot\hat{\mathbf{q}})(\boldsymbol{\mu}_n\cdot\hat{\mathbf{q}})-\boldsymbol{\mu}_e\cdot\boldsymbol{\mu}_n)|\alpha_1,\beta_1\rangle$$

où $\mathbf{q} = \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1$, et $\hat{\mathbf{q}}$ est le vecteur unité dans la direction de $\mathbf{q}$; on a défini le facteur de forme magnétique

$$F(\mathbf{q}) = \int \mathrm{d}^3 r_e\ |\phi(\mathbf{r}_e)|^2 \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_e}$$

c) Calculez la section efficace à l'aide de la règle d'or; moyennez sur les spins initiaux et sommez sur les spins finaux (section paramagnétique non polarisée). Exprimez le résultat en fonction de g, $F(\mathbf{q})$ et le rayon classique de l'électron r_0.

CHAPITRE 4

Deuxième Quantification

Les premiers cours de mécanique quantique se concentrent sur des systèmes qui n'ont qu'un petit nombre de degrés de liberté, dans le but évident de simplifier l'exposé. Cette approche permet de couvrir des systèmes importants (par exemple des atomes isolés dans des champs extérieurs) mais ne permet pas de couvrir la plupart des systèmes physiques importants, dans lesquels le nombre de degrés de liberté est quasi infini : solides, champ électromagnétique, etc. Ce chapitre est consacré au développement d'un langage utile à la description des systèmes ayant un nombre très grand de degrés de liberté.

Pour ce faire, nous partirons d'un espace des états à une particule et construirons un espace des états où le nombre de particules peut prendre plusieurs valeurs. Sur cet espace nous pourrons construire un hamiltonien incorporant les interactions entre les particules. Ce formalisme pourra être appliqué à la fois aux bosons et aux fermions, et permettra d'écrire de manière simple un hamiltonien représentant l'interaction d'un grand nombre (10^{23}) de particules identiques en incorporant de manière automatique les propriétés d'identité des particules.

1 Espace de Fock

Dans toute cette section nous emploierons la notation unidimensionnelle (pas de signes vectoriels) dans le but d'alléger la notation; des vecteurs seront cependant implicites.

1.1 États symétrisés

Considérons un type de particules identiques (des bosons) pour lequel V_1 est l'espace des états à une particule. Sur cet état on peut utiliser la base des positions $\{|x\rangle\}$. Tout état $|\psi\rangle$ dans V_1 peut alors être décomposé comme suit :

$$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}x \; \psi(x)|x\rangle \tag{1.1}$$

Rappelons que les états $|x\rangle$ ont la normalisation suivante :

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x') \tag{1.2}$$

Appelons V_n l'espace des états à n particules. Si les n particules n'étaient pas identiques, cet espace serait simplement le produit tensoriel de V_1 n fois : $\bar{V}_n = V_1 \otimes V_1 \otimes \ldots \otimes V_1$. Cependant, les particules étant des bosons, seul les états symétriques par rapport aux permutations des particules doivent être conservés. Ces états forment un sous-espace vectoriel V_n de $\bar{V}_n$.

Prenons le cas $n = 2$. Une base pour $\bar{V}_2$ est donnée par le produit tensoriel des états propres des positions des deux particules : $|x\rangle|y\rangle$. Une base pour V_2 est obtenue en sélectionnant la moitié de ces vecteurs de base : ceux qui sont symétriques lors de l'échange $x \leftrightarrow y$:

$$|x, y\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|x\rangle|y\rangle + |y\rangle|x\rangle\right) \tag{1.3}$$

Constatons que ces états ont la normalisation suivante :

$$\langle x', y'|x, y\rangle = \delta(x - x')\delta(y - y') + \delta(x - y')\delta(x' - y) \tag{1.4}$$

La relation de complétude dans V_2 (et non pas dans $\bar{V}_2$) prend alors la forme suivante :

$$\frac{1}{2} \int \mathrm{d}x\mathrm{d}y \; |x, y\rangle\langle x, y| = 1 \tag{1.5}$$

Cette relation se vérifie par application sur $|x', y'\rangle$. On peut alors définir la fonction d'onde à deux particules $\phi(x, y)$ associée à un état arbitraire $|\phi\rangle$ de V_2:

$$\phi(x, y) = \langle x, y|\phi\rangle \to |\phi\rangle = \frac{1}{2} \int \mathrm{d}x\mathrm{d}y \; \phi(x, y)|x, y\rangle \tag{1.6}$$

La généralisation à V_n est la suivante : les états de base sont définis par une somme sur les permutations possibles de n particules :

$$|x_1, x_2, \ldots, x_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{p \in S_n} |x_{p(1)}\rangle|x_{p(2)}\rangle \cdots |x_{p(n)}\rangle \tag{1.7}$$

Ici p dénote une des $n!$ permutations de S_n. On voit que

$$|x_1, x_2, \ldots, x_n\rangle = |x_{p(1)}, x_{p(2)}, \ldots, x_{p(n)}\rangle \tag{1.8}$$

et l'espace V_n engendré par les vecteurs (1.7) est manifestement symétrique par rapport à une permutation des particules.

Les états (1.7) ont la normalisation suivante :

$$\begin{aligned}
\langle x_1, x_2, \ldots, x_n|y_1, y_2, \ldots, y_n\rangle &= \frac{1}{n!} \sum_{p,q \,\in\, S_n} \langle x_{p(1)}|y_{q(1)}\rangle \cdots \langle x_{p(n)}|y_{q(n)}\rangle \\
&= \frac{1}{n!} \sum_{p,q \,\in\, S_n} \langle x_{pq^{-1}(1)}|y_1\rangle \cdots \langle x_{pq^{-1}(n)}|y_n\rangle \\
&= \sum_{p \,\in\, S_n} \langle x_{p(1)}|y_1\rangle \cdots \langle x_{p(n)}|y_n\rangle \\
&= \sum_{p \,\in\, S_n} \delta(x_{p(1)} - y_1) \cdots \delta(x_{p(n)} - y_n)
\end{aligned} \tag{1.9}$$

Dans la deuxième équation nous avons changé l'ordre des facteurs dans chaque terme, de sorte que $|y_1\rangle$ arrive en premier, $|y_2\rangle$ en deuxième, etc. Ceci est équivalent à changer l'indice i apparaissant dans $\langle x_{p(i)}|y_{q(i)}\rangle$ en $q^{-1}(i)$. Dans la troisième équation nous avons changé la variable de somme

p en pq, ce qui fait disparaître q de l'expression sommée et nous permet d'en calculer la somme trivialement : $\sum_q 1 = n!$. Le résultat de ce calcul peut s'exprimer sous la forme équivalente suivante :

$$\langle x_1, x_2, \ldots, x_n | y_1, y_2, \ldots, y_n \rangle = \sum_{p \in S_n} \delta(x_1 - y_{p(1)}) \cdots \delta(x_n - y_{p(n)}) \tag{1.10}$$

De cette normalisation on déduit la relation de complétude suivante :

$$1 = \frac{1}{n!} \int \prod_{i=1}^{n} \mathrm{d}x_i \; |x_1, x_2, \ldots, x_n\rangle \; \langle x_1, x_2, \ldots, x_n| \tag{1.11}$$

De même, on définit la fonction d'onde à n particules associée à l'état $|\phi\rangle$:

$$\begin{aligned} \phi(x_1, \ldots, x_n) &= \langle x_1, \ldots, x_n | \phi \rangle \\ |\phi\rangle &= \frac{1}{n!} \int \mathrm{d}x_1 \ldots \mathrm{d}x_n \; \phi(x_1, \ldots, x_n) | x_1, \ldots, x_n \rangle \end{aligned} \tag{1.12}$$

1.2 Opérateurs de création et d'annihilation

Définissons maintenant l'espace des états élargi :

$$V = V_0 \oplus V_1 \oplus V_2 \oplus V_3 \oplus \cdots \tag{1.13}$$

Cet espace porte le nom générique d'*espace de Fock*. Notons qu'il ne s'agit pas d'un produit tensoriel, mais d'une somme directe! Le seul état de V_0 est le vide $|0\rangle$, qui par définition ne contient aucune particule. La normalisation des vecteurs de base définit en quelque sorte le produit bilinéaire sur l'espace V_n. Pour compléter cette définition sur V, il faut spécifier que les espaces correspondant à des nombres différents de particules sont orthogonaux : $V_n \perp V_m$ si $n \neq m$.

Pour naviguer dans V il nous faut définir l'opérateur de création $\psi^\dagger(x)$, qui nous fait passer de V_n à V_{n+1}:

$$\psi^\dagger(x) | x_1, \ldots, x_n \rangle = | x, x_1, \ldots, x_n \rangle \tag{1.14}$$

Il ne s'agit que d'une définition : cet opérateur est défini par son action sur les états de base. L'adjoint de $\psi^\dagger(x)$ a alors l'action suivante :

$$\psi(x) | x_1, \ldots, x_n \rangle \; = \; \sum_i \delta(x - x_i) | x_1, \ldots \widehat{x_i}, \ldots, x_n \rangle \tag{1.15}$$

où $\widehat{x_i}$ signifie que cette position est omise. Pour démontrer cela, il suffit de vérifier que cette expression pour ψ est compatible avec la définition de l'adjoint, pour tous les vecteurs de base possibles. Le calcul explicite se fait comme suit :

$$\begin{aligned} \langle y_1 \ldots y_{n-1} | \psi(x) | x_1, \ldots, x_n \rangle &= \langle x, y_1 \ldots y_{n-1} | x_1, \ldots, x_n \rangle = \langle y_1 \ldots y_{n-1}, x | x_1, \ldots, x_n \rangle \\ &= \sum_{p \in S_n} \delta(y_1 - x_{p(1)}) \cdots \delta(y_{n-1} - x_{p(n-1)}) \delta(x - x_{p(n)}) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \left\{ \sum_{q \in S_{n-1}} \delta(y_1 - x_{q(1)}) \cdots \delta(y_{n-1} - x_{q(n)}) \right\} \delta(x - x_i) \quad [q(i) \text{ absent}] \\ &= \sum_{i=1}^{n} \delta(x - x_i) \langle y_1, \ldots, y_{n-1} | x_1, \ldots, \widehat{x_i}, \ldots, x_n \rangle \end{aligned} \tag{1.16}$$

Dans la troisième équation nous avons réarrangé la somme en regroupant les termes qui ont $\delta(x-x_i)$ en commun; il y a $(n-1)!$ termes de ce type pour chaque valeur de i. La dernière équation étant valable pour n'importe lequel état de base $\langle y_1, \ldots, y_{n-1}|$, on en conclut que la relation (1.15) est correcte.

Il est ensuite facile de démontrer la relation de commutation suivante :

$$\boxed{[\psi(x), \psi(y)] = 0 \qquad\qquad [\psi(x), \psi^\dagger(y)] = \delta(x-y)}$$

1.3 États antisymétrisés

Jusqu'ici nous n'avons considéré que des systèmes de bosons. À la différence des bosons, l'état d'un ensemble de fermions doit être antisymétrique lors de l'échange de deux fermions ou en général lors d'une permutation *impaire* de n fermions. Nous procéderons comme pour les bosons, mais avec moins de détails. La différence est que seuls les états antisymétriques de $\bar{V}_n$ feront partie de V_n.

Par exemple, dans le cas $n = 2$, les seuls états admis seront

$$|x, y\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle|y\rangle - |y\rangle|x\rangle) \tag{1.17}$$

Ces états sont antisymétriques ($|x, y\rangle = -|y, x\rangle$) et ont la normalisation suivante :

$$\langle x', y'|x, y\rangle = \delta(x-x')\delta(y-y') - \delta(x-y')\delta(x'-y) \tag{1.18}$$

La relation de complétude dans V_2 (et non pas dans $\bar{V}_2$) prend toujours la forme

$$\frac{1}{2}\int \mathrm{d}x\mathrm{d}y\ |x, y\rangle\langle x, y| = 1 \tag{1.19}$$

et la fonction d'onde à deux particules $\phi(x, y)$ associée à un état arbitraire $|\phi\rangle$ de V_2 est

$$\phi(x, y) = \langle x, y|\phi\rangle \qquad\qquad \phi(x, y) = -\phi(y, x) \tag{1.20}$$

La généralisation à V_n est la suivante :

$$|x_1, x_2, \ldots, x_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\sum_{p\in S_n} \varepsilon_p |x_{p(1)}\rangle|x_{p(2)}\rangle\cdots|x_{p(n)}\rangle \tag{1.21}$$

Ces états sont bels et bien antisymétriques :

$$\begin{aligned} |x_{p(1)}, x_{p(2)}, \ldots, x_{p(n)}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\sum_{q\ \in\ S_n} \varepsilon_q |x_{qp(1)}\rangle|x_{qp(2)}\rangle\cdots|x_{qp(n)}\rangle \\ &= \varepsilon_p \frac{1}{\sqrt{n!}}\sum_{q\ \in\ S_n} \varepsilon_q |x_{q(1)}\rangle|x_{q(2)}\rangle\cdots|x_{q(n)}\rangle \\ &= \varepsilon_p |x_1, x_2, \ldots, x_n\rangle \end{aligned} \tag{1.22}$$

Dans la deuxième équation, nous avons procédé à un changement de variable de sommation $q \to qp^{-1}$ et nous avons utilisé le fait que $\varepsilon_{qp^{-1}} = \varepsilon_q\varepsilon_{p^{-1}} = \varepsilon_q\varepsilon_p$.

Les états (1.21) ont la normalisation suivante :

$$\begin{aligned}\langle x_1, x_2, \ldots, x_n | y_1, y_2, \ldots, y_n\rangle &= \frac{1}{n!}\sum_{p,q\,\in\,S_n} \varepsilon_p\varepsilon_q \langle x_{p(1)}|y_{q(1)}\rangle \cdots \langle x_{p(n)}|y_{q(n)}\rangle \\ &= \frac{1}{n!}\sum_{p,q\,\in\,S_n} \varepsilon_{pq^{-1}} \langle x_{pq^{-1}(1)}|y_1\rangle \cdots \langle x_{pq^{-1}(n)}|y_n\rangle \\ &= \sum_{p\,\in\,S_n} \varepsilon_p \langle x_{p(1)}|y_1\rangle \cdots \langle x_{p(n)}|y_n\rangle \\ &= \sum_{p\,\in\,S_n} \varepsilon_p \delta(x_{p(1)} - y_1) \cdots \delta(x_{p(n)} - y_n)\end{aligned} \tag{1.23}$$

Dans la deuxième équation nous avons réarrangé l'ordre des facteurs dans chaque terme de sorte que les y_i apparaissent en ordre croissant; ceci revient à changer i en $q^{-1}(i)$. Nous avons aussi utilisé la propriété $\varepsilon_q = \varepsilon_{q^{-1}}$ et $\varepsilon_p\varepsilon_{q^{-1}} = \varepsilon_{pq^{-1}}$.

1.4 Relations d'anticommutation

Comme pour les bosons on définit des opérateurs de création et d'annihilation qui nous font passer de V_n à $V_{n\pm1}$. On définit toujours

$$\psi^\dagger(x)|x_1, \ldots, x_n\rangle = |x, x_1, \ldots, x_n\rangle \tag{1.24}$$

Cependant, l'adjoint de $\psi^\dagger(x)$ doit alors avoir l'action suivante :

$$\psi(x)|x_1, \ldots, x_n\rangle \;=\; \sum_i (-1)^{i+1}\delta(x - x_i)|x_1 \ldots \widehat{x_i} \ldots x_n\rangle \tag{1.25}$$

Voici les détails explicites du calcul :

$$\begin{aligned}\langle y_1 \ldots y_{n-1}|\psi(x)|x_1, \ldots, x_n\rangle &= \langle x, y_1 \ldots y_{n-1}|x_1, \ldots, x_n\rangle \\ &= (-1)^{n-1}\langle y_1 \ldots y_{n-1}, x|x_1, \ldots, x_n\rangle \\ &= (-1)^{n+1}\sum_{p\,\in\,S_n} \varepsilon_p \delta(y_1 - x_{p(1)}) \cdots \delta(y_{n-1} - x_{p(n-1)})\delta(x - x_{p(n)}) \\ [q(i)\text{ absent}] \quad &= (-1)^{n+1}\sum_{i=1}^{n}\left\{\sum_{q\,\in\,S_{n-1}} \varepsilon_q (-1)^{n-i}\delta(y_1 - x_{q(1)}) \cdots \delta(y_{n-1} - x_{q(n)})\right\}\delta(x - x_i) \\ &= \sum_{i=1}^{n}(-1)^{i+1}\delta(x - x_i)\langle y_1, \ldots, y_{n-1}|x_1, \ldots, \widehat{x_i}, \ldots, x_n\rangle\end{aligned} \tag{1.26}$$

Dans la troisième équation nous avons utilisé le fait que $\varepsilon_p = \varepsilon_q(-1)^{n-i}$ si $p(n) = i$ et si q est la restriction de p aux particules restantes.

La conséquence de l'action de $\psi(x)$ est que les relations de commutations sont remplacées par des relations d'anticommutation :

$$\boxed{\{\psi(x), \psi(y)\} = 0 \qquad\qquad \{\psi(x), \psi^\dagger(y)\} = \delta(x - y)} \tag{1.27}$$

où les accolades signfient un anticommutateur :

$$\{A, B\} \equiv AB + BA \tag{1.28}$$

Dans ce qui suit nous allons traiter des bosons et des fermions simultanément. Dans ce but nous utiliserons la notation suivante :

$$\eta = \begin{cases} 1 & \text{(bosons)} \\ -1 & \text{(fermions)} \end{cases} \qquad \eta_p = \begin{cases} 1 & \text{(bosons)} \\ \varepsilon_p & \text{(fermions)} \end{cases} \tag{1.29}$$

1.5 Densité et nombre de particules

On définit l'opérateur de *densité de particules*[1]

$$\rho(x) \equiv \psi^\dagger(x)\psi(x) \tag{1.30}$$

On vérifie les commutations suivantes, valables pour les bosons comme pour les fermions :

$$[\rho(x), \psi(y)] = -\delta(x-y)\psi(x) \qquad [\rho(x), \psi^\dagger(y)] = \delta(x-y)\psi^\dagger(x) \tag{1.31}$$

Ces relations démontrent que $\rho(x)$ représente la densité des particules au point x. Pour préciser ce point, considérons N_V, l'intégrale de ρ dans un volume V:

$$N_V = \int \mathrm{d}x\ \rho(x) = \int \mathrm{d}x\ \psi^\dagger(x)\psi(x) \tag{1.32}$$

L'intégration des commutateurs ci-haut donne

$$[N_V, \psi(y)] = \begin{cases} -\psi(y) & \text{si} \quad y \in V \\ 0 & \text{autrement} \end{cases} \tag{1.33}$$

(une relation similaire existe pour $\psi^\dagger$). On constate alors que $\psi(y)$ et $\psi^\dagger(y)$ sont des opérateurs d'échelle pour N_V: ils en diminuent ou augmentent la valeur par 1, ce qui confirme que N_V représente le nombre de particules dans V et que $\rho(x)$ a bien l'interprétation voulue.

Parallèlement à cet opérateur densité on définit un opérateur de courant :

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^\dagger \nabla\psi - \nabla\psi^\dagger\psi\right) \tag{1.34}$$

Le flux de la valeur moyenne de cet opérateur à travers une surface quelconque est le nombre moyen de particules traversant cette surface par unité de temps. Remarquons la parfaite analogie avec la densité de probabilité et le courant de probabilité en mécanique quantique à une particule.

[1] Ne pas confondre avec l'*opérateur densité* en mécanique statistique.

1.6 États de base différents

La base définie en (1.7) est celle des états propres de la position. Cependant, toute autre base peut faire l'affaire. En particulier, on peut définir les états suivants à l'aide de la base des états propres de l'impulsion $\{|k\rangle\}$ (ou du vecteur d'onde):

$$|k_1, k_2, \ldots, k_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{p \in S_n} \eta_p |k_{p(1)}\rangle |k_{p(2)}\rangle \cdots |k_{p(n)}\rangle \tag{1.35}$$

pour lesquels la normalisation est (d est la dimension)

$$\langle k_1, k_2, \ldots, k_n | q_1, q_2, \ldots, q_n\rangle = (2\pi)^{nd} \sum_p \eta_p \delta(k_1 - q_{p(1)}) \ldots \delta(k_n - q_{p(n)}) \tag{1.36}$$

et la relation de complétude

$$1 = \frac{1}{n!} \int \prod_{i=1}^{n} (\mathrm{d}k_i)\ |k_1, k_2, \ldots, k_n\rangle\ \langle k_1, k_2, \ldots, k_n| \tag{1.37}$$

La fonction d'onde est toujours définie comme

$$\phi(k_1, \ldots, k_n) = \langle k_1, \ldots, k_n | \phi\rangle \tag{1.38}$$

Les opérateurs de création et d'annihilation dépendent maintenant de k. $\psi^\dagger(k)$ crée un état d'impulsion k et $\psi(k)$ détruit un état d'impulsion k. Ces opérateurs obéissent aux relations

$$\boxed{\begin{array}{lll} [\psi(k), \psi(q)] = 0 & [\psi(k), \psi^\dagger(q)] = 2\pi\delta(k-q) & \text{(bosons)} \\ \{\psi(k), \psi(q)\} = 0 & \{\psi(k), \psi^\dagger(q)\} = 2\pi\delta(k-q) & \text{(fermions)} \end{array}} \tag{1.39}$$

Étant donné que

$$|k\rangle = \int \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{ikx} |x\rangle \tag{1.40}$$

on démontre facilement que

$$\psi(k) = \int \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{-ikx} \psi(x) \qquad \psi^\dagger(k) = \int \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{ikx} \psi(x)^\dagger \tag{1.41}$$

En général, si on désire utiliser les avantages d'une base arbitraire (discrète) $\{|r\rangle\}$, on définit les états comme ci-haut, avec la correspondance

$$\delta(x-y) \to \delta_{rs} \qquad \int \mathrm{d}x \to \sum_r \tag{1.42}$$

La transformation unitaire qui nous fait passer des états $|k\rangle$ aux états $|r\rangle$ est la même qui nous fait passer de $\psi^\dagger(k)$ à l'opérateur de création $\psi_r^\dagger$ associé à $|r\rangle$.

Notons cependant que dans le cas d'un spectre discret, les états $|r\rangle$ ne sont pas normalisés (bosons): on a

$$\langle r_1, r_2, \ldots, r_n | s_1, s_2, \ldots, s_n\rangle = \sum_p \eta_p\ \delta_{r_1, s_{p(1)}} \ldots \delta_{r_n, s_{p(n)}} \tag{1.43}$$

Pour que les deux états ne soient pas orthogonaux, ils doivent contenir la même liste d'indices modulo l'ordre dans lequel les indices apparaissent. On peut dénoter un état par un ensemble de k indices r_i et le nombre n_i de fois que cet indice apparait ($\sum_i^k n_i = n$). Autrement dit, l'ensemble des (r_i, n_i) représente l'état

$$|\phi\rangle = |\underbrace{r_1, \ldots, r_1}_{n_1}, \ldots, \underbrace{r_k, \ldots, r_k}_{n_k}\rangle \tag{1.44}$$

On démontre facilement que cet état a la normalisation suivante :

$$\langle\phi|\phi\rangle = n_1! n_2! \ldots n_k! \tag{1.45}$$

Dans le cas de fermions, la fonction d'onde associée à un état antisymétrique a la forme suivante :

$$\begin{aligned}
\langle x_1, x_2, \ldots, x_n | r_1, r_2, \ldots, r_n\rangle &= \frac{1}{n!} \sum_{p,q \in S_n} \varepsilon_p \varepsilon_q \langle x_{p(1)}| \cdots \langle x_{p(n)}||r_{q(1)}\rangle \cdots |r_{q(n)}\rangle \\
&= \frac{1}{n!} \sum_{p,q \in S_n} \varepsilon_p \varepsilon_q \langle x_{pq^{-1}(1)}| \cdots \langle x_{pq^{-1}(n)}||r_1\rangle \cdots |r_n\rangle \\
&= \sum_{p \in S_n} \varepsilon_p \langle x_{p(1)}| \cdots \langle x_{p(n)}||r_1\rangle \cdots |r_n\rangle \\
&= \sum_{p \in S_n} \varepsilon_p \psi_{r_1}(x_{p(1)}) \cdots \psi_{r_n}(x_{p(n)}) \\
&= \det |\psi_{r_i}(x_j)|
\end{aligned} \tag{1.46}$$

Cette fonction d'onde est un *déterminant de Slater*:

$$\Psi(x_1, \ldots, x_n) = \det \begin{vmatrix} \psi_{r_1}(x_1) & \cdots & \psi_{r_1}(x_n) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_{r_n}(x_1) & \cdots & \psi_{r_n}(x_n) \end{vmatrix} \tag{1.47}$$

2 Hamiltonien à un corps

Dans cette section nous allons exprimer, en fonction des opérateurs de création et d'annihilation, un hamiltonien ne comportant que des termes à un corps, c'est-à-dire ne comportant pas d'interaction entre les particules. Les termes à un corps sont l'énergie cinétique de chaque particule et l'énergie potentielle externe que ressent chaque particule séparément. Nous discuterons aussi de la solution générale à ce type d'hamiltonien, c'est-à-dire de la forme des états propres.

2.1 Opérateurs à un corps

Soit O un opérateur agissant dans l'espace des états à une particule V_1. Par exemple, O peut être l'énergie cinétique $P^2/2m$ de la particule, ou un potentiel extérieur $V(x)$ auquel chaque particule est soumise. L'action de O sur l'espace à une particule V_1 est bien définie. On s'intéresse ici à un hamiltonien H_1 qui est la somme de cet opérateur à un corps sur toutes les particules du système :

$$H_1 = \sum_{i=1}^{n} O_i \tag{2.1}$$

où la somme est faite sur les n particules figurant dans l'espace V_n. O_i est une copie de O agissant sur la i^e copie de V_1 figurant dans V_n:

$$\begin{aligned} O_1|x_1,\ldots,x_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\sum_p \eta_p O|x_{p(1)}\rangle|x_{p(2)}\rangle\cdots|x_{p(n)}\rangle \\ O_2|x_1,\ldots,x_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\sum_p \eta_p |x_{p(1)}\rangle O|x_{p(2)}\rangle\cdots|x_{p(n)}\rangle \\ &\text{etc}\ldots \end{aligned} \tag{2.2}$$

C'est à cette i^e copie de V_1 qu'on fait référence en parlant de la i^e particule, car bien sûr les particules elles-mêmes sont indiscernables et on ne peut les numéroter.

Le but de cette sous-section est de démontrer la formule suivante pour H_1:

$$\boxed{H_1 = \int \mathrm{d}x\mathrm{d}y\ \langle y|O|x\rangle\ \psi^\dagger(y)\psi(x)} \tag{2.3}$$

où $\langle y|O|x\rangle$ est l'élément de matrice de O entre deux états de base à une particule. En fonction de cet élément de matrice, l'action de O sur une particule peut s'écrire ainsi :

$$O|x\rangle = \int \mathrm{d}y\ \langle y|O|x\rangle|y\rangle \tag{2.4}$$

Pour démontrer la formule (2.3), étudions l'effet de H_1 sur un état de base à n particules, en utilisant la relation ci-dessus :

$$H_1|x_1,\ldots,x_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\sum_{i,p}\eta_p\int \mathrm{d}y\ \langle y|O|x_{p(i)}\rangle\ |x_{p(1)}\rangle\cdots\underbrace{|y\rangle}_{i}\cdots|x_{p(n)}\rangle \tag{2.5}$$

où y apparaît à la position i. Pour une valeur fixe de $p(i)$, la somme sur p fait passer $|y\rangle$ partout dans le produit tensoriel et on peut écrire

$$\begin{aligned} H_1|x_1,\ldots,x_n\rangle &= \sum_i \eta^{i+1}\int \mathrm{d}y\ \langle y|O|x_i\rangle\ |y,x_1,\ldots\widehat{x_i},\ldots,x_n\rangle \\ &= \int \mathrm{d}x\mathrm{d}y\ \langle y|O|x\rangle\ \sum_i \eta^{i+1}\delta(x-x_i)|y,x_1,\ldots\widehat{x_i},\ldots,x_n\rangle \\ &= \int \mathrm{d}x\mathrm{d}y\ \langle y|O|x\rangle\ \psi^\dagger(y)\psi(x)|x_1,\ldots,x_n\rangle \end{aligned} \tag{2.6}$$

La formule (2.3) est donc vérifiée pour un état de base arbitraire $|x_1,\ldots,x_n\rangle$ et donc pour tous les états.

Énergie cinétique

Comme premier exemple, considérons l'énergie cinétique $O = P^2/2m$. L'élément de matrice est

$$\begin{aligned}\langle y|O|x\rangle &= \int (\mathrm{d}p)\ \frac{\hbar^2 p^2}{2m}\langle y|p\rangle\langle p|x\rangle \\ &= \frac{1}{2m}\int (\mathrm{d}p)\ \hbar^2 p^2 \mathrm{e}^{ip(y-x)} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 \int (\mathrm{d}p)\ \mathrm{e}^{ip(y-x)} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 \delta(y-x)\end{aligned} \tag{2.7}$$

L'opérateur H_1 correspondant est alors

$$\begin{aligned}H_1 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int \mathrm{d}x\mathrm{d}y\ \partial_x^2\delta(x-y)\psi^\dagger(y)\psi(x) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int \mathrm{d}x\mathrm{d}y\ \delta(x-y)\psi^\dagger(y)\partial_x^2\psi(x) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int \mathrm{d}x\ \psi^\dagger(x)\partial_x^2\psi(x)\end{aligned} \tag{2.8}$$

Énergie potentielle

Comme deuxième exemple, considérons un potentiel $O = V(x)$ commun à toutes les particules. L'élément de matrice est simplement $\langle y|V|x\rangle = V(x)\langle y|x\rangle$, et

$$H_1 = \int \mathrm{d}x\ V(x)\psi^\dagger(x)\psi(x) \tag{2.9}$$

Ainsi donc on pourrait écrire un hamiltonien comprenant l'énergie cinétique de chaque particule et un potentiel commun $V(x)$ de la façon suivante :

$$H_1 = \int \mathrm{d}x\ \psi^\dagger(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)\right)\psi(x) \tag{2.10}$$

Cet hamiltonien ne comporte aucune interaction entre les particules. En notation tridimensionnelle, on écrirait plutôt

$$\boxed{H_1 = \int \mathrm{d}^3r\ \psi^\dagger(\mathbf{r})\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r})} \tag{2.11}$$

Base des ondes planes

On peut très bien écrire cet hamiltonien en fonction des opérateurs de création et d'annihilation associés à la base des impulsions, tout simplement en utilisant les transformées de Fourier :

$$H_1 = \int (\mathrm{d}k)\ \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi^\dagger(k)\psi(k) + \int (\mathrm{d}k)(\mathrm{d}q)\ \tilde{V}(k-q)\psi^\dagger(k)\psi(q) \tag{2.12}$$

où $\tilde{V}(k)$ est la transformée de Fourier du potentiel $V(x)$:

$$\tilde{V}(k) = \int \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{-ikx}V(x) \tag{2.13}$$

2.2 États propres

Dans cette sous-section nous allons donner la forme générale des états propres d'un hamiltonien à un corps comme (2.11). Écrivons l'hamiltonien comme

$$H = \int \mathrm{d}^3 r \; \psi^\dagger \mathcal{D} \psi \qquad\qquad \mathcal{D} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) \tag{2.14}$$

$\mathcal{D}$ est un opérateur différentiel hermitique. Cet opérateur différentiel possède en principe un ensemble de fonctions propres orthogonales φ_r:

$$\mathcal{D}\varphi_r(\mathbf{r}) = E_r \varphi_r(\mathbf{r}) \qquad\qquad \int \mathrm{d}^3 r \; \varphi_r^*(\mathbf{r})\varphi_s(\mathbf{r}) = \delta_{rs} \tag{2.15}$$

Ces fonctions propres peuvent servir de base dans l'espace des fonctions; ceci implique que l'opérateur $\psi(\mathbf{r})$ peut être développé selon cet ensemble de fonctions propres :

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_r c_r \varphi_r(\mathbf{r}) \qquad\qquad c_r = \int \mathrm{d}^3 r \; \varphi_r^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \tag{2.16}$$

Ici les φ_r sont de simples fonctions complexes, alors que les coefficients c_r sont des opérateurs, obéissant à la relation de commutation

$$\begin{array}{lll} [c_r, c_s^\dagger] = \delta_{rs} & [c_r, c_s] \;\; = 0 & \text{(bosons)} \\ \{c_r, c_s^\dagger\} = \delta_{rs} & \{c_r, c_s\} = 0 & \text{(fermions)} \end{array} \tag{2.17}$$

Ces relations de commutation se démontrent facilement en y substituant l'expression (2.16) et en utilisant les relations de commutation de l'opérateur $\psi(\mathbf{r})$. Notons que dans le cas des bosons, ce sont les relations de commutation d'un ensemble d'oscillateurs harmoniques indépendants.

En fonction des opérateur c_r, l'hamiltonien prend la forme suivante :

$$\begin{aligned} H &= \sum_{r,s} \int \mathrm{d}^3 r \; c_r^\dagger c_s \varphi_r^*(\mathbf{r}) \mathcal{D} \varphi_s(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{r,s} \int \mathrm{d}^3 r \; c_r^\dagger c_s E_s \varphi_r^*(\mathbf{r}) \varphi_s(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{r,s} c_r^\dagger c_s E_s \delta_{rs} \\ &= \sum_r E_r c_r^\dagger c_r \end{aligned} \tag{2.18}$$

L'hamiltonien a donc la forme associée à un nombre infini d'oscillateurs harmoniques découplés, chacun avec une fréquence $\omega_r = E_r/\hbar$.

Bosons

Dans le cas des bosons, l'hamiltonien (2.11) décrit donc une somme d'oscillateurs harmoniques découplés. Nous connaissons les états propres d'un tel système :

$$|n_1, \ldots, n_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! \ldots n_k!}} (c_1^\dagger)^{n_1} \cdots (c_k^\dagger)^{n_k} |0\rangle \tag{2.19}$$

où $|0\rangle$ est l'état fondamental de tous les oscillateurs, annihilé par tous les c_r. Évidemment, le développement (2.16) nous permet d'affirmer que $\psi(\mathbf{r})|0\rangle = 0$ pour toute valeur de $\mathbf{r}$ et donc que $|0\rangle$ coïncide avec le vide défini plus haut.

Le vide n'est cependant pas l'état fondamental, car ce dernier dépend du nombre de particules dans le système. Comme l'opérateur N du nombre de particules, donné par

$$N = \int \mathrm{d}^3 r \; \psi^\dagger(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \sum_r c_r^\dagger c_r \quad , \tag{2.20}$$

commute avec l'hamiltonien, les états propres de H ont un nombre déterminé de particules et il existe un état fondamental pour chaque valeur de N. Dans le cas de bosons, l'état fondamental à N particules est obtenu en plaçant les N particules dans l'état de plus basse énergie :

$$|\Omega\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(c_1^\dagger\right)^N |0\rangle \tag{2.21}$$

où on a supposé que les états à une particule sont numérotés dans l'ordre croissant des énergies : $E_1 < E_2 < E_3 < \cdots$.

Fermions

Dans le cas des fermions, l'hamiltonien (2.11) est une somme d'*oscillateurs fermioniques* découplés. Un oscillateur fermionique est défini par l'hamiltonien et les relations d'anticommutation suivants :

$$H = Ec^\dagger c \qquad\qquad \{c, c^\dagger\} = 1 \quad , \quad \{c, c\} = 0 \tag{2.22}$$

Comme pour l'oscillateur harmonique, l'opérateur $N = c^\dagger c$ représente un nombre entier, qui est augmenté par l'action de $c^\dagger$ et diminué par celle de c, en raison des relations de commutations suivantes, qu'il est facile de démontrer :

$$[N, c] = -c \qquad\qquad [N, c^\dagger] = c^\dagger \tag{2.23}$$

À la différence d'un oscillateur harmonique, on a les relations $c^2 = 0$ et $(c^\dagger)^2 = 0$, qui font qu'il n'y a que deux états indépendants dans l'espace de Hilbert : $|0\rangle$ (tel que $c|0\rangle = 0$) et $|1\rangle = c^\dagger|0\rangle$. Ces états ont respectivement les valeurs propres $N = 0$ et $N = 1$.

Les états propres d'une somme d'oscillateurs fermioniques découplés sont spécifiés en identifiant quels sont les oscillateurs occupés, c'est-à-dire ceux qui sont dans l'état $|1\rangle$. Le fait qu'on ne puisse pas placer plus d'une particule dans un oscillateur (ou niveau à une particule) donné est le *principe d'exclusion* de Pauli. Le vide $|0\rangle$ est bien sûr annihilé par tous les opérateurs c_r: $c_r|0\rangle = 0$. L'état fondamental à N particules est obtenu en occupant les N oscillateurs ayant les énergies les plus basses :

$$|\Omega\rangle = \left\{ \prod_{r=1}^{N} c_r^\dagger \right\} |0\rangle \tag{2.24}$$

où on a encore une fois supposé que les oscillateurs étaient numérotés dans l'ordre d'énergie croissante. L'*énergie de Fermi* E_F est par définition l'énergie associée au N^{me} niveau d'énergie à une particule; $E_F = E_N$. Tous les niveaux sont alors remplis jusqu'au niveau de Fermi. L'ensemble des niveaux inférieurs à E_F est appelé *mer de Fermi*. Les états excités sont obtenus en dépeuplant un ou plusieurs niveaux dans la mer de Fermi et en peuplant des niveaux au-dessus de la mer de Fermi.

2.3 Gaz de bosons et de fermions libres

Considérons ici le plus simple de tous les hamiltoniens décrivant des particules identiques : le gaz de particules libres. Les particules sont non seulement *indépendantes*, c'est-à-dire qu'elles n'interagissent pas entre elles (le potentiel $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ est nul), mais elles sont aussi *libres*, car elles ne subissent pas l'influence d'un potentiel externe $V(\mathbf{r})$.

Plaçons ce système dans une boîte imaginaire de volume V afin de manipuler des états normalisés. Les états propres de l'Éq. (2.15) sont alors des ondes planes :

$$\varphi_r(\mathbf{r}) \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{V}} \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \qquad E_r \longrightarrow \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \tag{2.25}$$

Les opérateurs c_r définis plus haut sont en fait la transformée de Fourier de $\psi(\mathbf{r})$:

$$c_r \longrightarrow \psi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \int \mathrm{d}^3 r \; \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) \tag{2.26}$$

et obéissent aux relations de commutation suivantes :

$$\psi_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{q}}^\dagger - \eta \psi_{\mathbf{q}}^\dagger \psi_{\mathbf{k}} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}} \tag{2.27}$$

L'hamiltonien s'exprime donc comme

$$H = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^\dagger \psi_{\mathbf{k}} \qquad E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \tag{2.28}$$

L'état fondamental (normalisé) à N bosons est simplement

$$|\Omega\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(\psi_{\mathbf{0}}^\dagger\right)^N |0\rangle \quad \text{(bosons)} \tag{2.29}$$

où $\psi_{\mathbf{0}} = \psi_{\mathbf{k}=0}$. L'état fondamental (normalisé) à N fermions est obtenu en remplissant la mer de Fermi. Comme l'énergie ne dépend que de la grandeur de $\mathbf{k}$, la mer de Fermi est une sphère de rayon k_F (le nombre d'onde de Fermi) centrée à $\mathbf{k} = 0$. Le nombre d'états à l'intérieur de cette sphère doit être égal à N et s'obtient à l'aide de la correspondance suivante :

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} (\cdots) \longrightarrow \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} (\cdots) \tag{2.30}$$

On trouve donc

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{(2\pi)^3} \tfrac{4}{3} \pi k_F^3 = \frac{(2mE_F)^{3/2}}{6\pi^3 \hbar^3} \tag{2.31}$$

Une valeur fixe de E_F correspond donc à une densité N/V donnée.

3 Interaction à deux corps

Dans cette section nous allons exprimer, en fonction des opérateurs de création et d'annihilation, un hamiltonien ne comportant que des termes à deux corps, décrivant une interaction entre des particules identiques.

3.1 Opérateurs à deux corps

Dans le but d'incorporer dans un hamiltonien des interactions entre particules identiques, il faut tenir compte d'opérateurs *à deux corps*, qui agissent dans l'espace à deux particules V_2. Soit O un tel opérateur; son action peut être exprimée en fonction de ses éléments de matrice :

$$O|x,x'\rangle = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}y\mathrm{d}y' \ \langle y,y'|O|x,x'\rangle|y,y'\rangle \tag{3.1}$$

où on a inséré une relation de complétude sur les états à deux particules. Typiquement, O est un potentiel d'interaction $U(x,y)$, de sorte que $O|x\rangle|y\rangle = U(x,y)|x\rangle|y\rangle$ (dans cette sous-section, nous utilisons une notation unidimensionnelle pour alléger les expressions).

Un hamiltonien à deux corps est la somme sur toutes les paires de particules d'un opérateur à deux corps :

$$H_2 = \sum_{i<j} O_{ij} \tag{3.2}$$

où O_{ij} est une copie de O agissant dans le produit tensoriel des copies de V_1 associées aux positions i et j. Le but de cette sous-section est de démontrer l'expression suivante de H_2 en fonction des opérateurs de création et d'annihilation :

$$\boxed{H_2 = \int \frac{\mathrm{d}x\mathrm{d}x'}{2}\frac{\mathrm{d}y\mathrm{d}y'}{2} \ \langle y,y'|O|x,x'\rangle\psi^\dagger(y)\psi^\dagger(y')\psi(x')\psi(x)} \tag{3.3}$$

La preuve se fait un peu de la même manière que pour l'expression (2.3), sauf qu'elle est un peu plus compliquée. On applique H_2 sur un état de base à n particules :

$$H_2|x_1,\ldots,x_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\sum_{p,i<j}\eta_p O_{ij}|x_{p(1)}\rangle\cdots|x_{p(n)}\rangle \tag{3.4}$$

L'opérateur O_{ij} agit sur les états aux positions i et j. On montre facilement que

$$\langle y,y'|O|x_{p(i)}\rangle|x_{p(j)}\rangle|y,y'\rangle = \langle y,y'|O|x_{p(i)},x_{p(j)}\rangle|y\rangle|y'\rangle \tag{3.5}$$

et donc l'action de H_2 en fonction des éléments de matrice de O est

$$\begin{aligned} H_2|x_1,\ldots,x_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\sum_{p,i<j}\eta_p\int\frac{\mathrm{d}y\mathrm{d}y'}{2} \ \langle y,y'|O|x_{p(i)},x_{p(j)}\rangle\times \\ |x_{p(1)}\rangle\cdots\underbrace{|y\rangle}_{i}\cdots\underbrace{|y'\rangle}_{j}\cdots|x_{p(n)}\rangle \end{aligned} \tag{3.6}$$

où y et y' apparaissent aux positions i et j respectivement. La somme ci-haut est effectuée sur les $n(n-1)/2$ paire de particules et les $n!$ permutations des n particules. Il est possible de réarranger

les termes de cette somme afin de mettre en évidence les éléments de matrice qui contiennent la paire (x_i, x_j):

$$H_2|x_1,\ldots,x_n\rangle = \sum_{i<j}\int \frac{\mathrm{d}y\mathrm{d}y'}{2}\ \langle y,y'|O|x_i,x_j\rangle|x_1,\cdots,y,\cdots,y',\cdots,x_n\rangle \tag{3.7}$$

où y et y' sont aux positions i et j respectivement. On remet ensuite y et y' en première position (ce qui cause un signe $(-1)^{i+j+1}$ pour les fermions) et on remplace $|x_i, x_j\rangle$ dans l'élément de matrice par $|x, x'\rangle$, tout en introduisant une intégrale avec fonctions delta pour compenser :

$$\begin{aligned} H_2|x_1,\ldots,x_n\rangle = \sum_{i<j}\eta^{i+j+1}\int \frac{\mathrm{d}y\mathrm{d}y'}{2}\mathrm{d}x\mathrm{d}x'\ \langle y,y'|O|x,x'\rangle\delta(x-x_i)\delta(x'-x_j)\times \\ |y,y',x_1,\cdots\widehat{x_i},\cdots\widehat{x_j},\cdots,x_n\rangle \end{aligned} \tag{3.8}$$

Au lieu de sommer uniquement sur les paires distinctes $(i < j)$, on somme ensuite sur i et j indistinctement, mais on compense en divisant par deux et en tenant compte du signe généré par la transposition de i et j:

$$\begin{aligned} H_2|x_1,\ldots,x_n\rangle = \sum_{i,j}\eta^{i+j+1}\varepsilon_{ij}\int \frac{\mathrm{d}y\mathrm{d}y'}{2}\frac{\mathrm{d}x\mathrm{d}x'}{2}\ \langle y,y'|O|x,x'\rangle\delta(x-x_i)\delta(x'-x_j)\times \\ |y,y',x_1,\cdots\widehat{x_i},\cdots\widehat{x_j},\cdots,x_n\rangle \end{aligned} \tag{3.9}$$

où nous avons défini le symbole suivant :

$$\varepsilon_{ij} = \begin{cases} 1 & (i<j) \\ 0 & (i=j) \\ \eta & (i>j) \end{cases} \tag{3.10}$$

Or, la dernière expression est précisément ce qu'on obtient par appliquations successives de deux opérateurs d'annihilation et de deux opérateurs de création :

$$H_2|x_1,\ldots,x_n\rangle = \int \frac{\mathrm{d}x\mathrm{d}x'}{2}\frac{\mathrm{d}y\mathrm{d}y'}{2}\ \langle y,y'|O|x,x'\rangle\psi^\dagger(y)\psi^\dagger(y')\psi(x')\psi(x)|x_1,\cdots,x_n\rangle \tag{3.11}$$

L'ordre des opérateurs est très important, surtout en ce qui concerne les fermions. Ceci étant valable pour tous les états de base et pour tout n, on peut écrire H_2 comme en (3.3). Il est conseillé au lecteur de refaire la démonstration ci-haut en détail dans le cas particulier de trois particules $(n = 3)$, pour en suivre toutes les étapes plus clairement.

Considérons un système de particules en interaction avec un potentiel extérieur $V(x)$ et en interaction entre eux par un potentiel $U(r)$. Les éléments de matrices de l'opérateur à deux corps $U(r)$ sont :

$$\begin{aligned} \langle y,y'|U|x,x'\rangle &= U(x,x')\langle y,y'|x,x'\rangle \\ &= U(x,x')\left\{\delta(x-y)\delta(x'-y') + \eta\delta(x-y')\delta(x'-y)\right\} \end{aligned} \tag{3.12}$$

L'hamiltonien correspondant est alors

$$\begin{aligned} H = &\int \mathrm{d}x\ \psi^\dagger(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x)\right)\psi(x) \\ &+ \int \frac{\mathrm{d}x\mathrm{d}x'}{2}\ U(x-x')\psi^\dagger(x)\psi^\dagger(x')\psi(x')\psi(x) \end{aligned} \tag{3.13}$$

En notation tridimensionnelle, on écrirait plutôt

$$\boxed{\begin{aligned} H = &\int \mathrm{d}^3r\ \psi^\dagger(\mathbf{r})\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) \\ &+ \int \frac{\mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r'}{2}\ U(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\psi^\dagger(\mathbf{r})\psi^\dagger(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}) \end{aligned}} \tag{3.14}$$

Particules avec spin

Jusqu'ici nous n'avons considéré qu'une seule *espèce* de particules. En général nous devons travailler avec plusieurs espèces de particules, qui par exemple correspondent à différents états de spin, différentes orbitales, etc. L'incorporation de plusieurs espèces est tout-à-fait simple : il suffit d'ajouter aux variables continues $\mathbf{r}$ (position) ou $\mathbf{k}$ (vecteur d'onde) un indice discret σ représentant l'espèce. Par exemple, cet indice peut prendre les valeurs $\uparrow$ et $\downarrow$ pour un fermion de spin $\frac{1}{2}$. Les opérateurs de création et d'annihilation sont alors notés $\psi^\dagger_\sigma(\mathbf{r})$ et $\psi_\sigma(\mathbf{r})$, avec les relations de commutation

$$\begin{aligned} [\psi_\sigma(\mathbf{r}), \psi^\dagger_{\sigma'}(\mathbf{r}')] &= \delta_{\sigma\sigma'}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \qquad [\psi_\sigma(\mathbf{r}), \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}')] &= 0 \qquad \text{(bosons)} \\ \{\psi_\sigma(\mathbf{r}), \psi^\dagger_{\sigma'}(\mathbf{r}')\} &= \delta_{\sigma\sigma'}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \qquad \{\psi_\sigma(\mathbf{r}), \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}')\} &= 0 \qquad \text{(fermions)} \end{aligned} \tag{3.15}$$

Les intégrations sur $\mathbf{r}$ ou $\mathbf{r}'$ doivent alors être accompagnées de sommes sur σ et σ'. L'hamiltonien général d'une particule avec spin s'écrit alors ainsi :

$$\boxed{\begin{aligned} H = &\sum_\sigma \int \mathrm{d}^3r\ \psi^\dagger_\sigma(\mathbf{r})\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right)\psi_\sigma(\mathbf{r}) \\ &+ \sum_{\sigma,\sigma'} \int \frac{\mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r'}{2}\ U(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\psi^\dagger_\sigma(\mathbf{r})\psi^\dagger_{\sigma'}(\mathbf{r}')\psi_{\sigma'}(\mathbf{r}')\psi_\sigma(\mathbf{r}) \end{aligned}} \tag{3.16}$$

Il est sous-entendu ici que le potentiel d'interaction U entre les électrons ne dépend pas du spin, quoique le contraire soit en général possible.

3.2 Formulation lagrangienne

En mécanique classique, on peut remplacer les opérateurs ψ et $\psi^\dagger$ par des champs qu'on désigne par les mêmes symboles : ψ et ψ^*. L'hamiltonien (3.14) provient alors du lagrangien suivant :

$$\begin{aligned} L = &\int \mathrm{d}^3r\ \psi^*\left(i\hbar\dot{\psi} + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - V(\mathbf{r})\psi\right) \\ &- \int \frac{\mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r'}{2}\ U(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\psi^*(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{3.17}$$

On vérifie que le facteur de i dans la dérivée temporelle assure la réalité du lagrangien. Le moment conjugué à $\psi(\mathbf{r})$ est $i\hbar\psi^*(\mathbf{r})$, ce qui mène, après quantification, à la relation de commutation canonique

$$[\psi(\mathbf{r}), i\hbar\psi^\dagger(\mathbf{r}')] = i\hbar\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{3.18}$$

qui coïncide avec (1.16), ce qui confirme que le lagrangien a la forme adéquate pour les bosons. L'écriture d'un lagrangien classique menant aux relations d'anticommutation est plus subtile. De

telles relations ne peuvent pas découler d'une action dont les variables sont des nombres (réels ou complexes). En fait, on définit pour la cause des variables anticommutatives (ou variables de *Grassmann*) dont la dynamique mène à des relations d'anticommutation . Ce sujet est discuté à la section 9.3.

Si on oublie pour le moment les interactions à deux corps et qu'on tire les équations du mouvement de ce lagrangien (en variant le champ ψ^*) on trouve l'équation de Schrödinger de la mécanique quantique à une particule :

$$i\hbar\dot{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\mathbf{r})\psi \tag{3.19}$$

Il peut sembler curieux de trouver cette équation dans un contexte classique. C'est pour cette raison que la procédure décrite dans cette section a reçu le nom de *deuxième quantification*: on y procède à la quantification d'un champ (le champ de Schrödinger) dont la valeur classique est égale à la fonction d'onde à une particule. Il est cependant malsain de considérer cette procédure comme un deuxième processus de quantification. En fait, la mécanique quantique 'ordinaire' à un corps n'est pas une limite classique de la deuxième quantification, mais une restriction de l'espace des états à l'espace à une particule V_1.

4 Approximation de Hartree-Fock

L'hamiltonien décrivant un ensemble de fermions en interaction par un potentiel à deux corps $U(r)$ et plongés dans un potentiel externe V s'écrit comme suit (nous oublions les degrés de liberté de spin pour le moment):

$$\begin{aligned} H &= \int \mathrm{d}^3r\ \psi^\dagger(\mathbf{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_x^2 + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) \\ &\quad + \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r'\ \psi^\dagger(\mathbf{r})\psi^\dagger(\mathbf{r}')U(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)\psi(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}) \\ &= H_1 + H_2 \end{aligned} \tag{4.1}$$

où H_1 est H_2 sont respectivement les hamiltoniens à un et à deux corps.

En principe H_1 est soluble. Son état fondamental $|\Omega\rangle$ est la mer de Fermi des états à une particule avec énergies $E \leq E_F$. En d'autres termes, $|\Omega\rangle$ est le déterminant de Slater formé des N états ayant les plus basses énergies (N est le nombre de particules). En revanche, l'état fondamental de $H = H_1 + H_2$ nous est inconnu et il n'y a aucune raison de croire qu'il soit une antisymétrisation d'états à une particules, c'est-à-dire un déterminant de Slater. En général le véritable état fondamental sera une combinaison linéaire de déterminants de Slater (ces derniers, rappelons-le, forment une base). Pour l'étudier nous en sommes réduits à des méthodes approximatives, comme la théorie des perturbations. C'est cependant une méthode variationnelle qui nous intéresse ici.

4.1 Méthode du champ auto-cohérent

La première méthode non perturbative utilisée dans le problème à N électrons fut celle de *Hartree*. Elle repose sur une base purement intuitive et suppose que l'état fondamental est un produit tensoriel simple d'états et que chaque électron se meut dans le potentiel moyen créé par tous les électrons. En clair, l'état fondamental est écrit comme

$$|\Phi_H\rangle = |\varphi_1\rangle|\varphi_2\rangle\cdots|\varphi_N\rangle \tag{4.2}$$

où les états à une particule $|\varphi_n\rangle$ sont orthonormaux. Cet état n'est pas antisymétrisé: c'est ce qui distingue l'approximation de Hartree de celle, plus réaliste, de Hartree-Fock. Sa fonction d'onde est simplement

$$\Psi_H(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N) = \varphi_1(\mathbf{r}_1)\cdots\varphi_N(\mathbf{r}_N) \tag{4.3}$$

La densité d'électrons au point $\mathbf{r}'$ dans cet état est

$$\rho(\mathbf{r}') = \sum_n |\varphi_n(\mathbf{r}')|^2 \tag{4.4}$$

et le potentiel moyen créé à $\mathbf{r}$ par ces électrons est

$$\bar{U}(\mathbf{r}) = \int \mathrm{d}^3r'\; U(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)\rho(\mathbf{r}') \tag{4.5}$$

En retour, ce potentiel moyen contribue à déterminer les fonctions d'ondes $\varphi_n(\mathbf{r})$ par l'équation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_x^2\varphi_n(\mathbf{r}) + [V(\mathbf{r}) + \bar{U}(\mathbf{r})]\varphi_n(\mathbf{r}) = \epsilon_n\varphi_n(\mathbf{r}) \tag{4.6}$$

Nous avons donc ici un problème auto-cohérent (*self-consistent*): Nous devons connaître les φ_n pour calculer $\bar{U}$ et vice-versa. Ce genre de problème se résout par itération : on commence par $\bar{U}^{(0)} = 0$ et on trouve une première approximation $\varphi_n^{(0)}$ aux fonctions d'ondes. Ensuite on calcule $\bar{U}^{(1)}$ à l'aide de ces fonctions d'onde et on résout de nouveau l'équation de Schrödinger pour trouver une deuxième approximation $\varphi_n^{(1)}$ qui à son tour nous permet de calculer $\bar{U}^{(2)}$ et ainsi de suite. Ces calculs sont évidemment faits sur ordinateur et le processus s'arrête quand il converge à la précision requise. La méthode de Hartree a été l'une des premières applications des ordinateurs à la physique[1].

Le principal défaut de la méthode de Hartree est qu'elle ne tient pas compte du principe de Pauli. La méthode de *Hartree-Fock* est un raffinement appréciable de la méthode de Hartree, dans laquelle on cherche un état fondamental approché ayant la forme d'un déterminant de Slater et se rapprochant le plus possible du véritable état fondamental, au sens variationnel : on minimise la valeur moyenne de l'hamiltonien dans cet état fondamental approché.

Plus précisément, on cherche un ensemble de fonctions propres orthonormales $\varphi_n(\mathbf{r})$ telles que la fonction d'onde du fondamental approché $|\Phi_0\rangle$ soit

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N) = \begin{vmatrix} \varphi_1(\mathbf{r}_1) & \ldots & \varphi_1(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_N(\mathbf{r}_1) & \ldots & \varphi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix} \tag{4.7}$$

[1] Hartree utilisait, dans les années 1930, des ordinateurs mécaniques, tels celui mis au point par V. Bush

Les N fonctions φ_n sont orthonormales et peuvent être complétées pour $n > N$ dans le but d'obtenir une base orthonormale complète en fonction desquelles le champ ψ se décompose ainsi :

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n a_n \varphi_n(\mathbf{r}) \tag{4.8}$$

On a alors la relation d'anticommutation $\{a_n, a_m^\dagger\} = \delta_{mn}$. Le vide $|0\rangle$ est toujours défini par la relation $\psi(\mathbf{r})|0\rangle = 0$ et l'état fondamental approché peut s'écrire

$$|\Phi_0\rangle = a_1^\dagger \dots a_N^\dagger |0\rangle$$

Le problème précis qui se pose maintenant est de minimiser l'énergie $\langle\Phi_0|H|\Phi_0\rangle$ par rapport à une variation des fonctions propres φ_n $(1 \leq n \leq N)$. Notons que les opérateurs a_n se trouvent à varier en même temps que les φ_n, puisque la relation (4.8) ne varie pas.

4.2 Théorème de Wick

Avant de pouvoir minimiser l'énergie $\langle\Phi_0|H|\Phi_0\rangle$, il faut pouvoir l'évaluer. Cette expression peut se ramener à une combinaison linéaire d'expressions de ce genre :

$$\begin{aligned} \langle c_n^\dagger c_m\rangle &\equiv \langle\Phi_0|c_n^\dagger c_m|\Phi_0\rangle \\ \langle c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l\rangle &\equiv \langle\Phi_0|c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l|\Phi_0\rangle \end{aligned}$$

Premièrement, il est évident que $\langle c_n^\dagger c_m\rangle$ s'annule si $n > N$ ou $m > N$. Au contraire, si $m, n < N$ on peut écrire

$$\begin{aligned} c_m|\Phi_0\rangle &= (-1)^{m+1} c_1^\dagger \dots \hat{c}_m^\dagger \dots c_N^\dagger |0\rangle \\ \langle\Phi_0|c_n^\dagger &= (-1)^{n+1} \langle 0|c_N \dots \hat{c}_n \dots c_1 \end{aligned} \tag{4.9}$$

où l'accent ($\hat{}$) signifie que le facteur correspondant est omis. Il s'ensuit que

$$\langle c_n^\dagger c_m\rangle = \begin{cases} \delta_{mn} & (n \leq N) \\ 0 & (n > N) \end{cases} \tag{4.10}$$

Deuxièmement, calculons $\langle c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l\rangle$. Encore une fois, cette quantité s'annule si l'un des indices i, j, k, l est plus grand que N. On constate que

$$\begin{aligned} c_k c_l|\Phi_0\rangle &= (-1)^{k+l} \varepsilon_{kl}\ c_1^\dagger \dots \hat{c}_k^\dagger \dots \hat{c}_l^\dagger \dots c_N^\dagger |0\rangle \\ \langle\Phi_0|c_i^\dagger c_j^\dagger &= (-1)^{i+j+1} \varepsilon_{ij}\ \langle 0|c_N \dots \hat{c}_i^\dagger \dots \hat{c}_j^\dagger \dots c_1 \end{aligned} \tag{4.11}$$

où

$$\varepsilon_{kl} = \begin{cases} 1 & (k < l) \\ -1 & (k > l) \\ 0 & (k = l) \end{cases} \tag{4.12}$$

Le produit de ces deux expressions n'est non nul que si $i = k,\ j = l$ ou si $i = l,\ j = k$:

$$\begin{aligned} \langle c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l\rangle &= -\varepsilon_{kl}\varepsilon_{ij}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \\ &= \delta_{il}\delta_{jk} - \delta_{ik}\delta_{jl} \end{aligned} \tag{4.13}$$

À l'aide de ces résultats, on trouve facilement que

$$
\begin{aligned}
\langle \Phi_0 | \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) | \Phi_0 \rangle &= \sum_n^N |\varphi_n(\mathbf{r})|^2 \\
\langle \Phi_0 | \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) | \Phi_0 \rangle &= \sum_{m,n}^N |\varphi_n(\mathbf{r})|^2 |\varphi_m(\mathbf{r}')|^2 \\
&\quad - \sum_{m,n}^N \varphi_n^*(\mathbf{r}) \varphi_n(\mathbf{r}') \varphi_m^*(\mathbf{r}') \varphi_m(\mathbf{r})
\end{aligned}
\tag{4.14}
$$

Le premier des deux termes de la deuxième équation est appelé *terme direct* et le second *terme d'échange*.

La généralisation de ce résultat à des expressions plus compliquées s'exprime comme suit : si on dénote la moyenne $\langle c_i^\dagger c_j \rangle$ par le symbole suivant :

$$
\langle c_i^\dagger c_j \rangle = i \; j \tag{4.15}
$$

On peut écrire la moyenne précédente comme

$$
\langle c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l \rangle = i \; j \; k \; l - i \; j \; k \; l \tag{4.16}
$$

et une moyenne à six facteurs comme suit :

$$
\begin{aligned}
\langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_3^\dagger c_4 c_5 c_6 \rangle \;=\; & 1\;2\;3\;4\;5\;6 - 1\;2\;3\;4\;5\;6 \\
& + 1\;2\;3\;4\;5\;6 - 1\;2\;3\;4\;5\;6 \\
& + 1\;2\;3\;4\;5\;6 - 1\;2\;3\;4\;5\;6
\end{aligned}
\tag{4.17}
$$

(on a remplacé les indices symboliques par des nombres pour alléger la notations). Le trait reliant un opérateur de création à un opérateur d'annihilation symbolise une *contraction*, c'est-à-dire un facteur $\langle c_i^\dagger c_j \rangle$. La moyenne d'un produit de n opérateurs de création avec n opérateurs d'annihilation est égale à la somme de toutes les contractions possibles, chacune prise avec le signe de la permutation nécessaire pour amener tous les opérateurs immédiatement à côté de leur partenaire en contraction. Ce résultat est une forme du *théorème de Wick*, à la base de la théorie des perturbations en théorie des champs (diagrammes de Feynman).[2]

[2] Notons que ce théorème, tel qu'exprimé ici, n'est pas valable pour des bosons, en raison de la possibilité d'une occupation macroscopique de l'état fondamental. Cependant, il est valable si on exclut cette possibilité, comme par exemple à température finie. Dans ce cas, les signes des différents termes sont tous positifs, car des relations de commutation remplacent alors les relations d'anticommutation entre les opérateurs de création et d'annihilation.

4.3 Équations de Hartree-Fock

En utilisant le résultat (4.14), la valeur moyenne de l'hamiltonien dans l'état Hartree-Fock est

$$\begin{aligned}\langle\Phi_0|H|\Phi_0\rangle = &\sum_n^N \int \mathrm{d}^3r\ \varphi_n^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_x^2 + V(\mathbf{r})\right]\varphi_n \\ &+ \frac{1}{2}\sum_{m,n}^N \int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r'\ U(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\Big[|\varphi_n(\mathbf{r})|^2|\varphi_m(\mathbf{r}')|^2 \\ &\qquad - \varphi_n^*(\mathbf{r})\varphi_m^*(\mathbf{r}')\varphi_n(\mathbf{r}')\varphi_m(\mathbf{r})\Big]\end{aligned} \tag{4.18}$$

Notre tâche est de minimiser cette valeur moyenne en utilisant le calcul des variations sur les fonctions φ_n. Cependant, nos fonctions doivent être orthonormales et cette contrainte peut être incorporée dans la valeur moyenne à l'aide de multiplicateurs de Lagrange en ajoutant le terme suivant :

$$\sum_{m,n}^N \gamma_{mn}\left\{\int \mathrm{d}^3r\ \varphi_m^*(\mathbf{r})\varphi_n(\mathbf{r}) - \delta_{mn}\right\} \tag{4.19}$$

En effectuant une variation de $\varphi_n^*(\mathbf{r})$, on obtient l'équation suivante :

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_x^2\varphi_n(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\varphi_n(\mathbf{r}) + \sum_m^N \int \mathrm{d}^3r'\ U(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|\varphi_m(\mathbf{r}')|^2\varphi_n(\mathbf{r}) \\ - \sum_m^N \int \mathrm{d}^3r'\ U(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\varphi_m^*(\mathbf{r}')\varphi_n(\mathbf{r}')\varphi_m(\mathbf{r}) + \sum_m^N \gamma_{nm}\varphi_m(\mathbf{r}) = 0\end{aligned} \tag{4.20}$$

Bien sûr, la variation des multiplicateurs γ_{mn} ne fait que reproduire les contraintes d'orthonormalité.

Nous avons donc obtenu un ensemble de N équations intégro-différentielles non linéaires couplées. Il va sans dire qu'il est hors de question de les résoudre de manière analytique! Signalons toutefois la simplification suivante : il est possible d'effectuer une transformation unitaire des fonctions propres φ_n sans affecter le déterminant de Slater, c'est-à-dire sans affecter l'état de Hartree-Fock. La solution des équations ci-haut n'est donc pas unique. Nous pouvons restreindre le choix des solutions en demandant que la matrice γ_{mn} des multiplicateurs soit diagonale : $\gamma_{mn} = \epsilon_n\delta_{mn}$. Dans ce cas, les équations de Hartree-Fock peuvent s'écrire comme suit :

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_x^2\varphi_n(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r})\varphi_n(\mathbf{r}) - \int \mathrm{d}^3r'\ V_E(\mathbf{r},\mathbf{r}')\varphi_n(\mathbf{r}') = \epsilon_n\varphi_n(\mathbf{r})} \tag{4.21}$$

où nous avons défini le potentiel de Hartree V_H et le potentiel non local d'échange V_E:

$$\boxed{\begin{aligned}V_H(\mathbf{r}) &= V(\mathbf{r}) + \sum_m^N \int \mathrm{d}^3r'\ U(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|\varphi_m(\mathbf{r}')|^2 \\ V_E(\mathbf{r},\mathbf{r}') &= \sum_m^N U(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\varphi_m^*(\mathbf{r}')\varphi_m(\mathbf{r})\end{aligned}} \tag{4.22}$$

Les équations de Hartree-Fock se résolvent de manière itérative, comme les équations de Hartree. La différence est la présence du potentiel non local d'échange V_E.

Les quantités ϵ_n jouent donc le rôle d'énergies à une particule, ce qui nous permettrait d'écrire un hamiltonien deuxième quantifié (version Hartree-Fock) comme

$$H_{HF} = \sum_n \epsilon_n c_n^\dagger c_n \tag{4.23}$$

Cependant, nous devons garder à l'esprit que la solution variationnelle qui provient des équations (4.21) n'est valide que pour une valeur précise de N. Si on augmente la valeur de N, les équations de Hartree-Fock sont modifiées et toutes les fonctions propres changent en général. En termes plus intuitifs, le fait de rajouter une particule modifie le potentiel dans lequel toutes les autres particules se meuvent. L'énergie $E_{HF}(N)$ de l'état variationnel dépend donc de N. Cependant, l'approximation de Hartree-Fock ne serait pas très utile si ce changement était énorme. Le *théorème de Koopman* stipule que l'énergie Hartree-Fock $E_{HF}(N)$ du système à N particules, moins l'énergie Hartree-Fock $E_{HF}(N-1)$ du système à $N-1$ particules, mais calculée à l'aide des mêmes fonctions φ_n que pour le système à N particules, est précisément égale à l'énergie de la N^e particule :

$$E_{HF}(N) - E_{HF}(N-1) = \epsilon_N \tag{4.24}$$

Ceci signifie que si la variation des fonctions φ_n est d'ordre δ lorsqu'on enlève une particule, alors l'énergie gagnée en enlevant une particule est donnée, à l'ordre δ^2, par ϵ_N, le niveau d'énergie le plus élevé parmi les niveaux occupés. On suppose donc que les niveaux d'énergie et les fonctions propres de Hartree-Fock sont une approximation raisonnable même si plusieurs particules sont enlevées du système, pourvu que ce nombre soit petit par rapport à N. Ceci nous permet d'utiliser les fonctions propres obtenues pour un système à N particules pour décrire un système de M particules ($1-M/N$ petit) mais dans lequel certaines particules sont excitées à des niveaux supérieurs.

Tableau 4.1 Niveaux d'énergie du fondamental de l'ion H^- et de l'atome d'Hélium obtenus par diverses méthodes (tiré de Ballentine).

méthode	H^- (Ry)	He (Ry)
Hartree-Fock	instable	-5,72336
État variationnel	-1,05550	-5,807449
Expérience	-1,055	-5,80744

Hartree-Fock et les atomes simple

La méthode de Hartree-Fock est une méthode variationnelle limitée, puisqu'elle prend comme état variationnel un seul déterminant de Slater. D'autres méthodes variationnelles peuvent s'approcher plus de l'état fondamental en utilisant des combinaisons linéaires de déterminants de Slater comme fonctions d'onde d'essai. Le tableau ci-contre donne les valeurs (en Rydberg) de l'énergie du fondamental de l'ion H^- et de l'Hélium obtenue (a) par la méthode de Hartree-Fock, (b) par la meilleure méthode variationnelle à date et (c) par l'expérience. On constate que l'ion H^- serait instable d'après l'approximation de Hartree-Fock, puisque son énergie serait plus grande que -1, c.-à-d. qu'il serait énergétiquement favorable à cet ion de se dissocier en un atome d'hydrogène (énergie -1) et un électron libre au repos (énergie 0).

Appendice A
Permutations

Une permutation est une opération qui change l'ordre d'un ensemble ordonné d'objets. On peut noter une permutation de n objets par le résultat qu'elle produit sur l'ensemble $(123\ldots n)$. Ainsi, $(213\ldots n)$ est le résultat de la permutation des deux premiers objets. Une permutation est appelée *transposition* lorsqu'elle n'affecte que deux des n objets, en les échangeant, comme dans l'exemple précédent. Une permutation est dite *cyclique* lorsque tous les objets sont déplacés du même nombre de positions, par exemple $(234\ldots n1)$.

Si p et q dénotent des permutations, alors le produit pq est la permutation obtenue en appliquant d'abord q aux n objets et ensuite p au résultat. Par exemple,

$$(21435)(23451) = (32541) \quad \text{et} \quad (23451)(21435) = (14352) \tag{A.1}$$

on constate que la multiplication des permutations n'est pas commutative. L'ensemble des permutations de n objets forme un groupe. En effet, chaque permutation a son inverse, avec lequel son produit donne la permutation unité $(123\ldots n)$. Ce groupe est noté S_n et comporte $n!$ éléments.

Chaque permutation peut être décomposée en un produit de transpositions. Par exemple, $(21435) = (21345)(12435)$. Une permutation est dite *paire* ou *impaire* selon que le nombre de transpositions requises pour la décomposer est pair ou impair. La *signature* ε_p d'une permuation est égale à 1 si la permutation est paire et -1 si elle est impaire. Évidemment, il y a plusieurs façons de décomposer une permutations en produit de transpositions, mais la signature d'une permutation ne change pas d'une décomposition à l'autre. La signature du produit pq de deux permutations est le produit des signatures :

$$\varepsilon_{pq} = \varepsilon_p \varepsilon_q \tag{A.2}$$

En d'autres termes, le produit de deux permutations de même parité est pair, alors que le produit de deux permutations de parités opposées est impair. Cela signifie entre autres que l'ensemble des permutations paires forme aussi un groupe, qui est un sous-groupe de S_n avec $n!/2$ éléments.

Si f_p est une quantité quelconque qui dépend d'une permutation p, on aura la relation

$$\sum_p f_{qp} = \sum_p f_{pq} = \sum_p f_p \tag{A.3}$$

Ceci provient du fait que qp est tour à tour égal à tous les éléments de S_n quand p passe par tous les éléments de S_n successivement.

Problème A.1 *Hamiltonien d'interaction*

Considérez l'hamiltonien suivant, représentant un système de particules identiques de masse m en interaction mutuelle par un potentiel $U(r)$:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \mathrm{d}^3r\ \psi^\dagger(\mathbf{r})\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + \int \frac{\mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r'}{2}\ U(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\psi^\dagger(\mathbf{r})\psi^\dagger(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}) \tag{A.4}$$

a) Montrez que l'opérateur N du nombre total de particules commute avec H et que, par conséquent, le nombre de particule demeure inchangé dans ce système.

b) Exprimez cet hamiltonien en fonction des opérateurs de création et d'annihilation $\psi^\dagger_{\mathbf{k}}$ et $\psi_{\mathbf{k}}$ relatifs à la base des états propres du vecteur d'onde et en fonction de la transformée de Fourier $\tilde{U}$ du potentiel d'interaction.

c) Expliquez comment calculer, au premier ordre dans la théorie des perturbations, la probabilité par unité de temps pour que deux particules, d'impulsions $\mathbf{q}$ et $\mathbf{p}$, diffusent l'une sur l'autre et se retrouvent dans des états d'impulsions $\mathbf{q}'$ et $\mathbf{p}'$. Calculez l'élément de matrice impliqué.

Problème A.2 *Fonctions de Corrélation*

a) Soit $\psi_\sigma(\mathbf{r})$ l'opérateur d'annihilation d'un électron de spin σ. On définit la fonction de corrélation simple $G_\sigma(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ comme suit :

$$G_\sigma(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \langle \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r})\psi_\sigma(\mathbf{r}')\rangle$$

où la valeur moyenne est prise dans l'état fondamental. Pour un gaz d'électrons libres, démontrez que

$$G_\sigma(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{3}{2}n\frac{\sin z - z\cos z}{z^3}$$

où n est la densité totale des électrons, $z = p_F|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ et p_F est le nombre d'onde de Fermi (le niveau de Fermi est $E_F = \hbar^2 p_F^2/2m$). Montrez que pour des petites distances, on a

$$G_\sigma(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{1}{2}n\left(1 - \frac{1}{10}p_F^2(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2\right)$$

b) On définit aussi la fonction de corrélation de paire

$$g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \langle \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r})\psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}')\psi_{\sigma'}(\mathbf{r}')\psi_\sigma(\mathbf{r})\rangle$$

Cette fonction donne la probabilité de trouver un électron de spin σ' au point $\mathbf{r}'$ et un de spin σ au point $\mathbf{r}$. Justifiez cette dernière phrase, et montrez que

$$g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \begin{cases} (n/2)^2 & \text{si} \quad \sigma \neq \sigma' \\ (n/2)^2\left[1 - \dfrac{9(\sin z - z\cos z)^2}{z^6}\right] & \text{si} \quad \sigma = \sigma' \end{cases}$$

où z est défini plus haut. Illustrez cette expression en fonction de la séparation $r = |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$. On constate qu'en un certain sens les fermions identiques se 'repoussent'. Note : le théorème de Wick vous sera utile.

c) On définit de même la fonction de corrélation de paire pour un gaz de bosons libres (sans spin):

$$g(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \langle \psi^\dagger(\mathbf{r})\psi^\dagger(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r})\rangle$$

Ici la valeur moyenne est prise dans un état ayant un nombre $n(\mathbf{k})$ de particules dans le mode de propagation $\mathbf{k}$. Montrez que

$$g(\mathbf{r},\mathbf{r}') = n^2 + \left|\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k})\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\right|^2 - \frac{1}{V^2}\sum_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k})[n(\mathbf{k})+1]$$

où V est le volume de la boîte dans laquelle le système a été mis et n est la densité totale des bosons. Supposons que l'on ait affaire à un faisceau de bosons avec une distribution d'occupation gaussienne

$$n(\mathbf{k}) \propto \exp -\alpha(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)^2/2$$

(ici α est une constante et $\mathbf{k}_0$ est le vecteur d'onde moyen du faisceau). Montrez que

$$g(\mathbf{r},\mathbf{r}') = n^2\left(1 + \exp -(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2/\alpha\right)$$

C'est-à-dire que la probabilité de trouver deux bosons au même endroit est deux fois celle de les trouver éloignés l'un de l'autre.

Problème A.3

Généralisez les équations de Hartree-Fock (4.21) et (4.22) pour des fermions avec spin, en supposant que l'interaction ne dépend pas du spin. Ne refaites pas toute la démonstration, mais n'effectuez que les substitutions appropriées.

Problème A.4 *Gaz d'électrons et approximation de Hartree-Fock*

On désire étudier un système d'électrons en interaction coulombienne à l'aide de l'approximation de Hartree-Fock. En clair, il s'agit d'étudier le cas où $V(\mathbf{r}) = 0$ et $U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = e^2/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$.

a) Justifiez, par des arguments de symétrie, l'utilisation d'ondes planes $\varphi_n(\mathbf{r}) \to \exp i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ comme fonctions d'ondes à une particule.

b) Montrez que les niveaux d'énergie à une particule dans l'approximation de Hartree-Fock ont la forme suivante :

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - \frac{2e^2}{\pi} k_F F(x)$$

où k_F est le niveau de Fermi, $x = k/k_F$ et $F(x)$ est une fonction de x:

$$F(x) = \frac{1}{2} + \frac{1 - x^2}{4x} \ln \left| \frac{1 + x}{1 - x} \right|$$

Problème A.5 *Correction à l'énergie du fondamental d'un système de particules identiques*

Un ensemble de N particules libres de masse m (N est très grand, disons $\sim 10^{23}$) interagissent faiblement entre elles par un potentiel $U(r)$ qui ne dépend que de la distance entre deux particules.

a) S'il s'agit de bosons identiques, donnez une expression, au premier ordre de la théorie des perturbations, de la correction à l'énergie E_0 du niveau fondamental, causée par l'interaction. Cette expression fait intervenir l'interaction moyenne entre les particules, définie par

$$\bar{U} = \frac{1}{V} \int \mathrm{d}^3 r \; U(\mathbf{r})$$

b) Même question, cette fois pour des fermions identiques (sans spin). En plus de $\bar{U}$, l'expression demandée implique une double intégrale sur les vecteurs d'onde dans la sphère de Fermi, intégrale qu'il est bien sûr impossible de calculer sans connaître la forme précise de U.

Problème A.6 *Fermions avec spin dans un champ magnétique*

a) Écrivez l'hamiltonien, dans le langage de la deuxième quantification, d'un système de N fermions identiques de spin $\frac{1}{2}$ avec facteur gyromagnétique γ en présence d'un champ magnétique uniforme $\mathbf{B}$.

b) Quel est l'état fondamental de ce système et comment son énergie dépend-elle de B ?

c) Calculez l'aimantation moyenne dans l'état fondamental et la susceptibilité magnétique associée.

d) Écrivez une expression pour l'interaction dipolaire dans le langage de la deuxième quantification. Rappelons que l'interaction dipolaire entre deux moments magnétiques $\mathbf{m}_1$ et $\mathbf{m}_2$ à des positions $\mathbf{r}_1$ et $\mathbf{r}_2$ est

$$H_{\text{dip.}} = \frac{1}{r^3} \left(\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2 - 3(\mathbf{n} \cdot \mathbf{m}_1)(\mathbf{n} \cdot \mathbf{m}_2) \right) - \frac{8\pi}{3} \mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$$

où $\mathbf{n}$ est le vecteur unité dans la direction $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$.

e) Selon vous, quel système physique réel pourrait être décrit par cet hamiltonien total $(H_1 + H_2)$?

CHAPITRE 5

Applications à la physique du solide

1 Fonctions de Bloch et de Wannier

1.1 Réseaux

Dans cette sous-section nous expliquons comment procéder à l'analyse de Fourier dans un réseau cristallin. Rappelons qu'un réseau Γ est l'ensemble des points obtenus par combinaisons linéaires entières d'une base $\{\mathbf{e}_i\}$, $(i = 1, 2, 3)$:

$$\Gamma = \{\mathbf{n} = n_i \mathbf{e}_i | n_i \in \mathbb{Z}\} \tag{1.1}$$

Le réseau *réciproque* ou *dual*, noté Γ^*, est l'ensemble des points $\mathbf{k}$ tels que $\mathbf{n} \cdot \mathbf{k} \in 2\pi\mathbb{Z}$. On démontre immédiatement que cette condition définit bien un réseau, c'est-à-dire que $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \in \Gamma^* \to \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 \in \Gamma^*$. On choisit sur Γ^* une base $\{\mathbf{e}_i^*\}$ telle que $\mathbf{e}_i^* \cdot \mathbf{e}_j = 2\pi\delta_{ij}$. Il est évident que le réseau réciproque du réseau réciproque est le réseau original lui-même : $\Gamma^{**} = \Gamma$.

Un ensemble de points de l'espace forme une *maille élémentaire* s'il est possible d'obtenir n'importe quel point de l'espace en ajoutant un vecteur du réseau à un point de la maille élémentaire et s'il est impossible de trouver deux points de la maille élémentaire qui diffèrent par un vecteur du réseau. En d'autre termes, pour tout $\mathbf{r}$, il existe un point unique $\mathbf{r}_0$ de la maille élémentaire et un vecteur unique $\mathbf{n} \in \Gamma$ tels que $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + \mathbf{n}$. Il y a bien sûr une infinité de mailles élémentaires possibles. Par exemple, on peut prendre le parallélépipède dont les arêtes sont les trois vecteurs de base $\mathbf{e}_i$. Il est alors évident que le volume de la maille élémentaire est

$$V_\Gamma = \mathbf{e}_1 \cdot (\mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3) \tag{1.2}$$

Les vecteurs de base du réseau réciproque peuvent être choisis comme suit :

$$\mathbf{e}_1^* = \frac{2\pi}{V_\Gamma}\mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 \qquad \mathbf{e}_2^* = \frac{2\pi}{V_\Gamma}\mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1 \qquad \mathbf{e}_3^* = \frac{2\pi}{V_\Gamma}\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \tag{1.3}$$

Comme maille élémentaire du réseau réciproque on choisit la *zone de Brillouin*, centrée autour du vecteur $\mathbf{k} = 0$. Son volume est évidemment donné par

$$V_{\Gamma^*} = \frac{(2\pi)^3}{V_\Gamma} \tag{1.4}$$

Nous nous intéresserons dans cette section à des fonctions périodiques sur le réseau, c'est-à-dire à des fonctions du type $u(\mathbf{r})$ telles que $u(\mathbf{r}+\mathbf{n}) = u(\mathbf{r})$ si $\mathbf{n} \in \Gamma$. Une telle fonction peut être décomposée en série de Fourier comme suit :

$$\begin{aligned} u(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}\in\Gamma^*} u_{\mathbf{k}}\ \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \\ u_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{V_\Gamma}\int_{\mathrm{M.E.}} \mathrm{d}^3r\ u(\mathbf{r})\ \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \end{aligned} \tag{1.5}$$

L'indice ME signifie que l'intégrale est prise sur la maille élémentaire. La seconde de ces équations a été obtenue en vertu de l'identité suivante :

$$\int_{\mathrm{M.E.}} \mathrm{d}^3r\ \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = V_\Gamma \delta_{\mathbf{k},0} \qquad (\mathbf{k}\in\Gamma^*) \tag{1.6}$$

Cette identité se démontre explicitement, en procédant à un changement de variables d'intégration vers les coordonnées t_i définies par $\mathbf{r} = t_i\mathbf{e}_i$ et dont le domaine est de 0 à 1. L'identité analogue pour le réseau réciproque est

$$\int_{\mathrm{Z.B.}} (\mathrm{d}^3k)\ \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} = \frac{1}{V_\Gamma}\delta_{\mathbf{n},0} \qquad (\mathbf{n}\in\Gamma) \tag{1.7}$$

La version réciproque de (1.5) est utilisée pour une fonction $f_{\mathbf{n}}$ qui ne dépend que du site sur le réseau :

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{n}} &= \int_{\mathrm{Z.B.}} (\mathrm{d}^3k)\ \tilde{f}(\mathbf{k})\ \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} \\ \tilde{f}(\mathbf{k}) &= V_\Gamma \sum_{\mathbf{n}\in\Gamma} f_{\mathbf{n}}\ \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} \end{aligned} \tag{1.8}$$

Le cas particulier de $u_{\mathbf{k}} = 1/V_\Gamma$ dans la formule (1.5) mène à l'identité suivante :

$$\frac{1}{V_\Gamma}\sum_{\mathbf{k}\in\Gamma^*} \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{n}\in\Gamma} \delta(\mathbf{r}+\mathbf{n}) \tag{1.9}$$

Il suffit d'intégrer sur $\mathbf{r}$ dans une maille élémentaire pour la démontrer explicitement. La version réciproque de cette relation est

$$V_\Gamma \sum_{\mathbf{n}\in\Gamma} \mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{n}} = \sum_{\mathbf{k}\in\Gamma^*} (2\pi)^3\delta(\mathbf{p}+\mathbf{k}) \tag{1.10}$$

En principe, nous devrions utiliser les fonctions delta suivantes, appropriées aux réseaux :

$$\begin{aligned} \delta_\Gamma(\mathbf{r}) &\equiv \sum_{\mathbf{n}\in\Gamma} \delta(\mathbf{r}+\mathbf{n}) \\ \delta_{\Gamma^*}(\mathbf{p}) &\equiv \sum_{\mathbf{k}\in\Gamma^*} \delta(\mathbf{p}+\mathbf{k}) \end{aligned} \tag{1.11}$$

Bien sûr, quand l'intégrale qui contient, par exemple, $\delta_{\Gamma^*}(\mathbf{p})$, est limitée à la zone de Brillouin, un seul terme du membre de droite de l'équation ci-haut y contribue.

En résumé, l'information contenue dans une fonction $f(\mathbf{k})$ définie sur la zone de Brillouin peut tout aussi bien être contenue dans une fonction $\tilde{f}_{\mathbf{n}}$ du site du réseau direct. De même, l'information contenue dans une fonction périodique $f(\mathbf{r})$ (c'est-à-dire définie dans la maille élémentaire) peut aussi être incorporée dans une fonction $\tilde{f}_{\mathbf{k}}$ définie sur le réseau réciproque Γ^*.

1.2 Fonctions de Bloch

Considérons ici un gaz d'électrons dont nous négligerons les corrélations, placé dans un réseau cristallin.[1] Pour étudier ce système sans interactions il faut résoudre l'équation de Schrödinger pour les fonctions propres :

$$H\varphi = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi + V(\mathbf{r})\varphi = E\varphi \tag{1.12}$$

où le potentiel $V(\mathbf{r})$ est créé par les ions du réseau et donc possède la périodicité du réseau : $V(\mathbf{r}+\mathbf{n}) = V(\mathbf{r})$ si $\mathbf{n} \in \Gamma$. On peut également tenir compte des interactions de façon minimale, en utilisant l'approximation de Hartree-Fock. On doit alors résoudre itérativement l'équation (4.21). Comme le potentiel d'interaction ne dépend que de la différence des coordonnées des électrons, il est lui-aussi invariant par rapport aux translations de toutes les coordonnées des électrons par un vecteur du réseau.

L'hamiltonien est ici invariant par une translation $T_{\mathbf{n}}$ d'un vecteur du réseau. L'action de cet opérateur sur la fonction d'onde est $T_{\mathbf{n}}\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}-\mathbf{n})$. Le fait que $[H, T_{\mathbf{n}}] = 0$ signifie qu'une fonction propre de H peut aussi être choisie fonction propre de $T_{\mathbf{n}}$, c.-à-d. $\varphi(\mathbf{r}-\mathbf{n}) \propto \varphi(\mathbf{r})$. La solution de cette équation est

$$\varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}u(\mathbf{p},\mathbf{r}) \tag{1.13}$$

où $u(\mathbf{p},\mathbf{r})$ est périodique en $\mathbf{r}$ et où $\mathbf{p}$ est un élément de la zone de Brillouin. La valeur propre de $T_{\mathbf{n}}$ dans cet état est alors $\mathrm{e}^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{n}}$. Il est important de comprendre que $\mathbf{p}$ n'est défini que modulo un vecteur du réseau réciproque Γ^*; c'est pour cela qu'on restreint le domaine de $\mathbf{p}$ à la zone de Brillouin. L'équation de Schrödinger peut alors être écrite en fonction de u:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\Big(\nabla^2 u + 2i\mathbf{p}\cdot\nabla u - \mathbf{p}^2 u\Big) + V(\mathbf{r})u = E(\mathbf{p})u \tag{1.14}$$

Cette équation est soluble en principe et nous fournit des niveaux d'énergie $E_n(\mathbf{p})$ qui sont fonctions de l'impulsion : ce sont les *bandes d'énergies*. L'indice n est maintenant un indice de bande et non un simple indice de niveau. Les solutions à cette équation sont notées $\varphi_n(\mathbf{p},\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}u_n(\mathbf{p},\mathbf{r})$ et appelées *fonctions de Bloch*. Elles forment une base orthogonale :

$$\int \mathrm{d}^3r\ \varphi^*_{m,\mathbf{q}}(\mathbf{r})\varphi_{n,\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = (2\pi)^3\delta_{mn}\delta_{\Gamma^*}(\mathbf{p}-\mathbf{q}) \tag{1.15}$$

Chaque fonction de Bloch est associée à un niveau d'énergie $E_n(\mathbf{p})$.

Opérateurs de création et d'annihilation

Nous pouvons reprendre ici le problème de la deuxième quantification, dans la base des fonctions de Bloch. Ceci signifie que l'opérateur d'annihilation sera décomposé dans cette base :

$$\boxed{\psi(\mathbf{r}) = \sum_n \int_{\text{Z.B.}} (\mathrm{d}^3p)\ c_n(\mathbf{p})\varphi_{n,\mathbf{p}}(\mathbf{r})} \tag{1.16}$$

En substituant la relation précédente et en utilisant la relation d'orthogonalité (1.15) des fonctions de Bloch, on trouve la relation inverse

$$c_n(\mathbf{p}) = \int \mathrm{d}^3r\ \varphi^*_{n,\mathbf{p}}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \tag{1.17}$$

[1] 'Négliger les corrélations' signifie qu'on considère les électrons comme indépendants, soit complètement, soit dans l'esprit de l'approximation de Hartree-Fock.

On vérifie sans peine les relations d'anticommutation suivantes :

$$\begin{aligned}\{c_m(\mathbf{q}), c_n^\dagger(\mathbf{p})\} &= (2\pi)^3 \delta_{mn} \delta_{\Gamma^*}(\mathbf{p}-\mathbf{q}) \\ \{c_m(\mathbf{q}), c_n(\mathbf{p})\} &= 0\end{aligned} \tag{1.18}$$

En reprenant les arguments généraux de la sous-section (2.2) et en les adaptant au cas particulier qui nous occupe, on voit que l'hamiltonien (1.12) peut s'écrire de la manière suivante :

$$\boxed{H = \sum_n \int_{\text{Z.B.}} (\mathrm{d}^3 p)\ E_n(\mathbf{p}) c_n^\dagger(\mathbf{p}) c_n(\mathbf{p})} \tag{1.19}$$

Bandes remplies ou demi-remplies

Les états propres de l'hamiltonien (1.19) nous sont connus : ce sont des particules d'impulsion $\mathbf{p}$ et d'énergie $E_n(\mathbf{p})$. L'état fondamental est la mer de Fermi, obtenue en occupant les N_e états ayant la plus basse énergie, N_e étant le nombre d'électrons du système. Selon la forme des bandes, la mer de Fermi peut avoir des caractéristiques bien différentes.[2] Si les bandes se recouvrent, la bande inférieure pourra ne pas être complètement remplie alors que la bande supérieure sera partiellement remplie. Dans le cas contraire, la mer de Fermi consistera en une bande complètement remplie ou une bande demi-remplie selon que le nombre d'électrons par site dans le système est pair ou impair. Ceci se voit facilement par le décompte suivant : Considérons un réseau pourvu d'un nombre N de sites, où N est cependant très grand. Il est encore possible de parler d'un réseau réciproque dans ce cas, sauf que les points de la zone de Brillouin sont discrets, c'est-à-dire ne forment plus un continuum. Dans la limite continue nous avons la correspondance

$$\sum_{\mathbf{p}} \to V \int_{\text{Z.B.}} (\mathrm{d}^3 p) \tag{1.20}$$

où $V = N V_\Gamma$ est le volume total du système. Si n_e est le nombre d'électrons par maille élémentaire, on peut donc écrire

$$\sum_n \int_{E_n(\mathbf{p})<E_F} (\mathrm{d}^3 p) = \frac{n_e}{V_\Gamma} \quad \text{ou} \quad \sum_n \int_{E_n(\mathbf{p})<E_F} \mathrm{d}^3 p = n_e V_{\Gamma^*} \tag{1.21}$$

Si on ne compte dans n_e que les électrons de valence (ceux qui vivent dans la bande occupée la plus haute) et si on tient compte du spin qui introduit une dégénérescence double des bandes, on obtient la relation

$$2 \int_{E_n(\mathbf{p})<E_F} \mathrm{d}^3 p = n_e V_{\Gamma^*} \tag{1.22}$$

Cela veut dire que pour $n_e = 1$, la bande est demi-remplie, alors qu'elle est complètement remplie pour $n_e = 2$. Il s'agit de la façon la plus élémentaire d'expliquer la différence entre un isolant (nombre pair d'électrons par maille) et un conducteur (nombre impair d'électrons par maille). Cette distinction simple entre conducteurs et isolants ne se base que sur l'hamiltonien à un corps et oublie l'influence très importante des corrections à l'approximation de Hartree-Fock.

[2] Nous ne décrirons pas en détail toutes les possibilités de bandes partiellement remplies, de gap indirect, etc. Ces sujets appartiennent au cours de physique du solide.

1.3 Fonctions de Wannier

Considérons, pour simplifier les choses, un système à une bande. On définit la *fonction de Wannier* $w(\mathbf{r}-\mathbf{n})$ somme suit :

$$\begin{aligned} w(\mathbf{r}-\mathbf{n}) &= \sqrt{V_\Gamma}\int_{\text{Z.B.}} (\mathrm{d}^3p)\ \mathrm{e}^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{n}}\varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \\ &= \sqrt{V_\Gamma}\int_{\text{Z.B.}} (\mathrm{d}^3p)\ \mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{n})}u(\mathbf{p},\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{1.23}$$

Vu que $u(\mathbf{p},\mathbf{r})$ est périodique, la dépendance fonctionnelle de w est bien en $\mathbf{r}-\mathbf{n}$. D'autre part, il s'ensuit de (1.10) que

$$\varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \sqrt{V_\Gamma}\sum_{\mathbf{n}\in\Gamma}\mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{n}}w(\mathbf{r}-\mathbf{n}) \tag{1.24}$$

Même si on ne dispose avec w que d'une seule fonction, définie sur tout l'espace, on peut tout de même en faire une collection de fonctions de base en déplaçant son argument par un vecteur de réseau. Ces fonctions sont orthonormales :

$$\begin{aligned} &\int \mathrm{d}^3r\ w^*(\mathbf{r}-\mathbf{n})w(\mathbf{r}-\mathbf{n}') \\ &\qquad = V_\Gamma\int_{\text{Z.B.}}(\mathrm{d}^3p)(\mathrm{d}^3q)\int \mathrm{d}^3r\ \mathrm{e}^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{n}-\mathbf{q}\cdot\mathbf{n}')}\varphi^*_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})\varphi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \\ &\qquad = V_\Gamma\int_{\text{Z.B.}}(\mathrm{d}^3p)\ \mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{n}-\mathbf{n}')} \\ &\qquad = \delta_{\mathbf{n},\mathbf{n}'} \end{aligned} \tag{1.25}$$

Liaisons faibles

À la différence de la fonction de Bloch, qui est délocalisée, la fonction de Wannier est localisée autour de chaque site du réseau. Comme exemple, considérons un système à une dimension dans lequel la fonction périodique u dépend faiblement de $\mathbf{p}$: $u(\mathbf{p},\mathbf{r}) \sim u(\mathbf{r})$ – il s'agit du cas de particules quasi-libres, dit des *liaisons faibles*. Le volume V_Γ devient ici la distance L entre deux sites du réseau et la fonction de Wannier est alors

$$\begin{aligned} w(x) &= \sqrt{L}\int_{-\pi/L}^{\pi/L}\frac{\mathrm{d}p}{2\pi}\ \mathrm{e}^{ipx}u(x) \\ &= \frac{\sin \pi x/L}{\pi x/L}\frac{u(x)}{\sqrt{L}} \end{aligned} \tag{1.26}$$

Le facteur $1/x$ localise cette fonction autour de $x=0$. Il s'agit ici d'un cas extrême, celui où les fonctions de Wannier sont les moins pertinentes.

Liaisons fortes

Dans la limite des liaisons fortes extrêmes – l'opposée du cas précédent – chaque électron de la bande est confiné à son ion (au site $\mathbf{n}$) et la fonction d'onde d'un état propre à une particule est une orbitale atomique $\phi(\mathbf{r}-\mathbf{n})$ centrée autour de cet ion. Les ions étant identiques, les différents états propres centrés sur des ions différents sont tous dégénérés et la bande d'énergie est infiniment étroite. Dans le but de respecter la forme des fonctions de Bloch, on peut prendre des combinaisons linéaires de ces états dégénérés :

$$\varphi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{n}\in\Gamma}\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}}\phi(\mathbf{r}-\mathbf{n}) \tag{1.27}$$

Ceci est précisément l'expression des fonction de Bloch par rapport aux fonctions de Wannier (modulo un facteur $\sqrt{V_\Gamma}$). Dans cette limite, ces dernières coïncident donc avec les orbitales atomiques $\phi(\mathbf{r}-\mathbf{n})$.

Opérateurs de création et d'annihilation

On peut aussi définir des opérateurs de création et d'annihilation $c_\mathbf{n}^\dagger$ et $c_\mathbf{n}$ associés aux fonctions de Wannier. En fonction de ces derniers, l'opérateur d'annihilation $\psi(\mathbf{r})$ s'exprime comme suit :

$$\boxed{\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{n}\in\Gamma} c_\mathbf{n} w(\mathbf{r}-\mathbf{n})} \tag{1.28}$$

La substitution de la définition de w dans cette expression nous permet de relier $c_\mathbf{n}$ à l'opérateur d'annihilation $c(\mathbf{k})$ dans un état de Bloch :

$$\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{V_\Gamma} \int_{\text{Z.B.}} (\mathrm{d}^3 p) \sum_{\mathbf{n}\in\Gamma} \mathrm{e}^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{n}} \varphi_\mathbf{p}(\mathbf{r})\ c_\mathbf{n} \tag{1.29}$$

En identifiant le coefficient de $\varphi_\mathbf{p}(\mathbf{r})$ et en comparant avec le développement (1.16), on trouve une expression de $c(\mathbf{p})$ en fonction de $c_\mathbf{n}$:

$$c(\mathbf{p}) = \sqrt{V_\Gamma} \sum_{\mathbf{n}\in\Gamma} \mathrm{e}^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{n}} c_\mathbf{n} \tag{1.30}$$

En substituant plutôt la relation (1.24) dans le développement (1.16), on trouve une expression de $c_\mathbf{n}$ en fonction de $c(\mathbf{p})$:

$$\boxed{c_\mathbf{n} = \sqrt{V_\Gamma} \int_{\text{Z.B.}} (\mathrm{d}^3 p)\ \mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{n}} c(\mathbf{p})} \tag{1.31}$$

En substituant la relation (1.30) dans l'expression (1.19) de l'hamiltonien à un corps, on trouve

$$\boxed{H = \sum_{\mathbf{n},\mathbf{n}'} t_{\mathbf{n},\mathbf{n}'} c_\mathbf{n}^\dagger c_{\mathbf{n}'}} \tag{1.32}$$

où on a défini l'*intégrale de saut*

$$t_{\mathbf{n},\mathbf{n}'} = V_\Gamma \int_{\text{Z.B.}} (\mathrm{d}^3 p)\ \mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{n}-\mathbf{n}')} E(\mathbf{p}) \tag{1.33}$$

satisfaisant $t^*_{\mathbf{n},\mathbf{n}'} = t_{\mathbf{n}',\mathbf{n}}$ (le cas de plusieurs bandes est une généralisation triviale). La spécification des intégrales de saut $t_{\mathbf{n},\mathbf{n}'}$ équivaut à celle de la relation de dispersion $E(\mathbf{p})$.

Par exemple, considérons une relation de dispersion quadratique :

$$E(\mathbf{p}) = E_0 + \frac{\hbar^2 \mathbf{p}^2}{2m} \tag{1.34}$$

L'intégrale de saut est alors donnée par

$$t_{\mathbf{n},\mathbf{n}'} = E_0 \delta_{\mathbf{n},\mathbf{n}'} + \frac{\hbar^2}{2m} V_\Gamma \int_{\text{Z.B.}} (\mathrm{d}^3 p)\ \mathbf{p}^2 \mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{n}-\mathbf{n}')} \tag{1.35}$$

En dimension 1, cette expression donne

$$t_{n,n'} = \begin{cases} E_0 + \dfrac{\hbar^2\pi^2}{6mL^2} & (n = n') \\ (-1)^{n-n'} \dfrac{\hbar^2}{m(n-n')^2L^2} & (n \neq n') \end{cases} \tag{1.36}$$

(ici n et n' sont des entiers qui numérotent les sites du réseau unidimensionnel : $\mathbf{n} = nL\hat{\mathbf{x}}$). Le coefficient $t_{n,n}$ multiplie l'opérateur N du nombre total de particules, une quantité conservée, et de ce fait n'est pas très intéressant.[3] Pour $n \neq n'$, on remarque que le saut diminue avec le carré de la distance. On peut à l'inverse se demander quelles relations de dispersion $E(\mathbf{p})$ découlent de différentes intégrales de saut. Cette question est assez simple pour être étudiée en exercice.

En général, les fonctions de Bloch sont utiles quand les interactions sont négligeables ou quand le nombre d'intégrales de saut est trop grand, c'est-à-dire quand elles ne diminuent pas assez rapidement avec la distance. On préfère cependant les fonctions des Wannier lorsque l'interaction est de courte portée et que les sauts se limitent aux sites voisins les plus immédiats, ce qui correspond à des bandes d'énergies étroites.

2 Modèle d'électrons localisés

2.1 Modèle de Hubbard

Ajoutons maintenant à notre hamiltonien (1.19) un terme d'interaction, décrit dans la base de Wannier :

$$H_2 = \frac{1}{4}\sum_{ijkl} \langle i,j|U|k,l\rangle c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k \tag{2.1}$$

Dans cette expression les indices $i, \ldots, k$ désignent des sites du réseau et constituent une abréviation pour $\mathbf{n}_i, \ldots, \mathbf{n}_k$. L'élément de matrice de l'interaction est

$$\langle i,j|U|k,l\rangle = \frac{1}{4}\int \mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2\mathrm{d}^3r_3\mathrm{d}^3r_4\ \langle i,j|\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2\rangle\langle \mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2|U|\mathbf{r}_3,\mathbf{r}_4\rangle\langle \mathbf{r}_3,\mathbf{r}_4|k,l\rangle \tag{2.2}$$

mais

$$\langle \mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2|U|\mathbf{r}_3,\mathbf{r}_4\rangle = U(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)[\delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_3)\delta(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_4) - \delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_4)\delta(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_3)] \tag{2.3}$$

et la fonction d'onde $\langle i,j|\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2\rangle$ est

$$\langle i,j|\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2\rangle = w^*(\mathbf{r}_1-\mathbf{n}_i)w^*(\mathbf{r}_2-\mathbf{n}_j) - w^*(\mathbf{r}_1-\mathbf{n}_j)w^*(\mathbf{r}_2-\mathbf{n}_i) \tag{2.4}$$

avec une expression similaire (sans la conjugaison complexe) pour $\langle \mathbf{r}_3,\mathbf{r}_4|k,l\rangle$. L'élément de matrice de l'interaction est donc

$$\langle i,j|U|k,l\rangle = \int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r'\ \Big\{w^*(\mathbf{r}-\mathbf{n}_i)w^*(\mathbf{r}'-\mathbf{n}_j)w(\mathbf{r}-\mathbf{n}_k)w(\mathbf{r}'-\mathbf{n}_l) - (i \leftrightarrow j)\Big\}U(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{2.5}$$

[3] En physique statistique, on dirait que $t_{n,n}$ contribue au potentiel chimique.

Jusqu'ici nous avons négligé les degrés de liberté de spin, absents de l'interaction (2.1). Cet oubli a comme conséquence qu'une interaction de très courte portée, comme par exemple le cas limite $U(\mathbf{r}) = U_0\delta(\mathbf{r})$, n'a pas d'effet : H_2 s'annule. En d'autres termes, le principe de Pauli mène déjà à une répulsion effective des fermions à courte portée et toute autre interaction de ce type est superflue. Cependant, le spin est bel et bien présent; les opérateurs doivent être affublés d'un indice de spin : $c_i \to c_{i,\sigma_i}$ et l'interaction prend la forme suivante :

$$H_2 = \frac{1}{4} \sum_{\substack{ijkl \\ \sigma_i\sigma_j\sigma_k\sigma_l}} \langle i\sigma_i, j\sigma_j|U|k\sigma_k, l\sigma_l\rangle c^\dagger_{i\sigma_i} c^\dagger_{j\sigma_j} c_{l\sigma_l} c_{k\sigma_k} \tag{2.6}$$

En supposant que l'interaction est indépendante du spin, l'élément de matrice devient

$$\begin{aligned} \langle i\sigma_i, j\sigma_j|U|k\sigma_k, l\sigma_l\rangle = \int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r' \; U(\mathbf{r}-\mathbf{r}')w^*(\mathbf{r}-\mathbf{n}_i)w^*(\mathbf{r}'-\mathbf{n}_j) \\ \times \left\{\delta_{\sigma_i\sigma_k}\delta_{\sigma_j\sigma_l} w(\mathbf{r}-\mathbf{n}_k)w(\mathbf{r}'-\mathbf{n}_l) - (k \leftrightarrow l)\right\} \end{aligned} \tag{2.7}$$

Dans la limite des liaisons fortes, les fonctions de Wannier sont très localisées et l'élément de matrice ci-haut n'est appréciable que si les quatres sites i, j, k, l coïncident. En posant

$$U_0 = \int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r' \; U(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|w(\mathbf{r})|^2|w(\mathbf{r}')|^2 \tag{2.8}$$

on écrit donc dans ce cas

$$\begin{aligned} H_2 &= \frac{1}{4}U_0 \sum_{i,\sigma,\sigma'} \left(c^\dagger_{i,\sigma}c^\dagger_{i,\sigma'}c_{i,\sigma'}c_{i,\sigma} - c^\dagger_{i,\sigma}c^\dagger_{i,\sigma'}c_{i,\sigma}c_{i,\sigma'}\right) \\ &= \frac{1}{2}U_0 \sum_{i,\sigma,\sigma'} c^\dagger_{i,\sigma}c^\dagger_{i,\sigma'}c_{i,\sigma'}c_{i,\sigma} \\ &= U_0 \sum_i n_{i,\uparrow}n_{i,\downarrow} \end{aligned} \tag{2.9}$$

En incluant l'énergie cinétique, on obtient le *modèle de Hubbard*:

$$\boxed{\begin{aligned} H &= \sum_{i\neq j,\sigma} t_{ij}c^\dagger_{i,\sigma}c_{j,\sigma} + U\sum_i n_{i,\uparrow}n_{i,\downarrow} \\ &= H_1 + H_0 \end{aligned}} \tag{2.10}$$

Dans ce modèle, les électrons sentent une énergie de répulsion U (ou d'attraction, selon le signe) au même site. Dans le cas de liaisons fortes, l'amplitude de saut t_{ij} est considérablement plus petite que la répulsion U. Nous pouvons alors considérer H_1 comme une perturbation ajoutée à H_0. Les états propres de H_0 sont infiniment dégénérés, puisque les différents sites sont découplés dans cet hamiltonien. Ils sont spécifiés par les nombres d'occupation (0 ou 1) de chaque spin à chaque site. Tous les états sans occupation double (un électron par site ou moins) auront une énergie $E_0 = 0$. Il est donc important d'étudier les corrections apportées par diverses perturbations; c'est l'importance relative de ces perturbations qui déterminera le comportement du système.

Avantage de la base de Wannier
C'est ici qu'apparait l'avantage d'utiliser la base de Wannier : si l'interaction est forte en comparaison de l'énergie cinétique ($U_0 \gg t_{ij}$) il est préférable d'utiliser la base de Wannier puisque dans celle-ci l'hamiltonien d'interaction est diagonal, alors que l'énergie cinétique est non-diagonale. Dans le cas contraire ($U_0 \ll t_{ij}$) il est préférable d'utiliser les fonctions de Bloch, qui diagonalisent l'énergie cinétique mais en fonction desquelles l'interaction est non diagonale. La base de Wannier est donc préférable dans le cas du couplage fort et celle de Bloch dans le cas du couplage faible. La base de Wannier trouve aussi son utilité dans les simulations numériques sur taille finie, car elle permet de simuler des fluctuations quantiques et thermiques *locales*.

Interprétation de t_{ij} comme intégrale de saut
On sait que H_1 provient de l'énergie cinétique des électrons. Pour rendre ce fait plus explicite dans ce contexte, il suffit de considérer un état initial $|0_i, \uparrow_j\rangle$ possédant un électron de spin en haut au site j et aucun électron au site i; le taux de transition de l'électron du site j au site i est donné en première approximation par la règle d'or de Fermi et implique l'amplitude de transition

$$\langle \uparrow_i, 0_j | H_1 | 0_i, \uparrow_j \rangle = t_{ij} \tag{2.11}$$

ce qui confirme l'interprétation de t_{ij} comme étant l'amplitude pour un électron de sauter du site j au site i.

2.2 Échange : modèle de Heisenberg

Dans la limite des liaisons fortes, les fonctions de Wannier sont très localisées et le cas $i = j = k = l$ domine dans (2.6). Il en résulte le modèle de Hubbard (2.10). Si l'intégrale de saut est relativement petite ($t_{ij} \ll U$), il est pertinent de se demander si d'autres termes de la somme (2.6), tout en étant petits par rapport à U, ne peuvent pas être appréciables. Nous nous concentrerons sur le cas d'un électron par site (bande demi-remplie). Nous allons montrer comment les états excités d'énergie basse relativement à U peuvent être décrits par l'*hamiltonien de Heisenberg*:

$$\boxed{H = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j} \tag{2.12}$$

où J est une constante (négative dans le cas présent) et la notation $\langle ij \rangle$ signifie qu'on somme sur les paires de sites qui sont des voisins immédiats (chaque lien n'est compté qu'un seule fois).

La contribution la plus importante à (2.6) après le terme dominant est obtenue quand on considère deux sites voisins, c'est-à-dire les termes suivants :[1]

$$\begin{array}{lll} (a) & i = j & k = l \\ (b) & i = k & j = l \\ (c) & i = l & j = k \end{array} \tag{2.13}$$

Dans le cas (a) on obtient la contribution suivante :

$$\begin{aligned} 2\frac{1}{4} \sum_{\langle ik \rangle} \sum_{\sigma,\sigma'} \int \mathrm{d}^3 r \mathrm{d}^3 r' \; & U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') w^*(\mathbf{r} - \mathbf{n}_i) w^*(\mathbf{r}' - \mathbf{n}_i) \\ & \times w(\mathbf{r} - \mathbf{n}_k) w(\mathbf{r}' - \mathbf{n}_k) \; c^\dagger_{i\sigma} c^\dagger_{i\sigma'} c_{k\sigma'} c_{k\sigma} \end{aligned} \tag{2.14}$$

[1] À demi remplissage, on montre que les termes du type $\langle ii|U|ij\rangle$ ont un effet équivalent à modifier l'énergie cinétique du modèle (H_1).

Cette contribution ne nous intéresse pas, car son action est triviale dans le sous-espace des états d'énergie $E_0 = 0$ de l'hamiltonien H_0 qui ne comportent pas plus d'un électron par site.

Les cas (b) et (c) mènent à la contribution

$$\frac{1}{4}\sum_{\langle ik\rangle}\sum_{\sigma,\sigma'}\Big\{G_{ik}n_{i,\sigma}n_{k,\sigma'} - J_{ik}c^\dagger_{i,\sigma}c_{i,\sigma'}c^\dagger_{k,\sigma'}c_{k,\sigma}\Big\} \tag{2.15}$$

où

$$\begin{aligned} G_{ik} &= \int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r'\ U(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|w(\mathbf{r}-\mathbf{n}_i)|^2|w(\mathbf{r}'-\mathbf{n}_k)|^2 \\ J_{ik} &= \int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r'\ U(\mathbf{r}-\mathbf{r}')w^*(\mathbf{r}-\mathbf{n}_i)w^*(\mathbf{r}'-\mathbf{n}_k)w(\mathbf{r}-\mathbf{n}_k)w(\mathbf{r}'-\mathbf{n}_i) \end{aligned} \tag{2.16}$$

Le cas (c) mène au même résultat que le cas (b). Dans le cas d'une bande demi-remplie, le terme en $n_{i,\sigma}n_{j,\sigma'}$ n'est pas pertinent, puisqu'il est constant dans le sous-espace fondamental.

Concentrons-nous donc sur le terme dit d'*échange direct*, proportionnel à l'intégrale d'échange J_{ij}:

$$H_2 = -\frac{1}{2}\sum_{\langle ij\rangle}\sum_{\sigma,\sigma'} J_{ij}c^\dagger_{i,\sigma}c_{i,\sigma'}c^\dagger_{j,\sigma'}c_{j,\sigma} \tag{2.17}$$

Appelons V_α le sous-espace des états engendré par les états, notés $|\alpha\rangle$, correspondant à une occupation simple de chaque site. Dans le cas où il y a autant d'électrons que de sites ces états sont les états fondamentaux dégénérés de H_0 et ont une énergie non perturbée nulle. Dans le sous-espace V_α il est possible d'exprimer cet hamiltonien en fonction des opérateurs de spin, en procédant comme suit. Premièrement, pour un site donné, on a les représentations matricielles suivantes :

$$\begin{aligned} c^\dagger_\uparrow c_\uparrow &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1+\sigma_3) \\ c^\dagger_\downarrow c_\downarrow &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1-\sigma_3) \\ c^\dagger_\uparrow c_\downarrow &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\sigma_1+i\sigma_2) \\ c^\dagger_\downarrow c_\uparrow &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\sigma_1-i\sigma_2) \end{aligned} \tag{2.18}$$

Considérons maintenant une paire $\langle ij\rangle$ donnée. Les quatre états de spin à considérer sont $|\uparrow\uparrow\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\downarrow\rangle$. On obtient

$$\begin{aligned} &\sum_{\sigma,\sigma'} c^\dagger_{i,\sigma}c_{i,\sigma'}c^\dagger_{j,\sigma'}c_{j,\sigma} \\ &\quad = \frac{1}{4}\Big\{(1+\sigma_{3,i})(1+\sigma_{3,j}) + (1-\sigma_{3,i})(1-\sigma_{3,j}) \\ &\qquad + (\sigma_{1,i}+i\sigma_{2,i})(\sigma_{1,j}-i\sigma_{2,j}) + (\sigma_{1,i}-i\sigma_{2,i})(\sigma_{1,j}+i\sigma_{2,j})\Big\} \\ &\quad = \frac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}_i\cdot\boldsymbol{\sigma}_j) \end{aligned} \tag{2.19}$$

En fonction des opérateurs de spin $\mathbf{S}_i \equiv \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_i$, le terme d'échange direct devient égal à l'hamiltonien de Heisenberg ferromagnétique (2.12), où nous avons défini $J = -J_{ij}$ et supposé que l'intégrale

d'échange J_{ij} est la même pour toutes les paires de plus proches voisins, c'est-à-dire dans toutes les directions.[2] Si on néglige complètement le terme cinétique ($t \to 0$) le terme d'échange devient le seul hamiltonien pertinent pour décrire les états excités de basse énergie par rapport à U. Il est qualifié de *ferromagnétique* parce que le signe négatif précédant la somme incite les spins à être parallèles dans l'état fondamental.

2.3 Super-échange

Dans la sous-section précédente nous avons montré comment l'effet de l'interaction entre les électrons dans des états de Wannier voisins, à demi-remplissage, peut être représenté par l'hamiltonien de Heisenberg dans le sous-espace de plus basse énergie de H_0. Nous allons maintenant montrer que l'effet du terme cinétique H_1 de l'hamiltonien (2.10) est similaire. Remarquons d'abord que H_1 décrit un processus de premier ordre par lequel un électron peut sauter au site voisin, ce qui nous fait quitter le sous-espace V_α puisque l'état final comprend deux électrons sur le même site. Cependant, le même H_1 au deuxième ordre de la théorie des perturbations nous permet d'échanger les électrons de deux sites voisins, par une succession de deux sauts. Nous allons montrer que ce processus mène à une description des états de basse énergie à l'aide du modèle de Heisenberg *antiferromagnétique* où la constante J est maintenant *positive* et donnée par

$$J = \frac{4t^2}{U} \tag{2.20}$$

Pour démontrer cela, distinguons trois catégories d'états propres de l'hamiltonien non perturbé H_0 décrit en (2.10): premièrement, les états $|\alpha\rangle$ décrits plus haut. Deuxièmement, les états notés $|\beta\rangle$ correspondant à une seule occupation double parmi tous les sites et ayant une énergie U. Finalement, les états notés $|\gamma\rangle$ représentant tous les autres états, d'énergies $2U$ et plus. Soit V_β le sous-espace généré par les états de type $|\beta\rangle$; on définit de même V_γ. L'action de H_1 sur un état de type $|\alpha\rangle$ donne une superposition d'états de type $|\beta\rangle$: $H_1|\alpha\rangle \in V_\beta$. Lorsque la perturbation H_1 est mise en place, les états propres dans V_α évoluent vers de nouveaux états propres formant un nouveau sous-espace d'états de basse énergie qu'on notera V_0. L'état perturbé $|\psi_\alpha\rangle$ provenant d'un état $|\alpha\rangle$ est donné par l'expression suivante au premier ordre en théorie des perturbations :

$$\begin{aligned}
|\psi_\alpha\rangle &= |\alpha\rangle + \sum_{E_m>0} \frac{\langle m|H_1|\alpha\rangle}{E_\alpha - E_m}|m\rangle \\
&= |\alpha\rangle - \frac{1}{U}\sum_\beta \langle\beta|H_1|\alpha\rangle|\beta\rangle \\
&= |\alpha\rangle - \frac{1}{U}\sum_m |m\rangle\langle m|H_1|\alpha\rangle \\
&= |\alpha\rangle - \frac{1}{U}H_1|\alpha\rangle
\end{aligned} \tag{2.21}$$

Dans la deuxième équation nous avons utilisé le fait que seuls les états $|\beta\rangle$ ont un élément de matrice non nul avec $|\alpha\rangle$. Dans la troisième nous avons utilisé le même fait pour étendre la sommation à tous les états, obtenant ainsi une relation de complétude.

[2] En realité, l'anisotropie spatiale, c'est-à-dire l'existence de couplages J_x, J_y et J_z différents selon les directions, est très fréquente.

Nous pouvons maintenant écrire l'hamiltonien $H_0 + H_1$ dans la base des états perturbés de basses énergies formant V_0 en calculant les éléments de matrice suivants :

$$\begin{aligned}\langle\psi_{\alpha'}|(H_0+H_1)|\psi_\alpha\rangle &= \left(\langle\alpha'| - \frac{1}{U}\langle\alpha'|H_1\right)(H_0+H_1)\left(|\alpha\rangle - \frac{1}{U}H_1|\alpha\rangle\right)\\ &= -\frac{1}{U}\langle\alpha'|H_1^2|\alpha\rangle + \mathcal{O}(1/U^2)\end{aligned} \tag{2.22}$$

Ceci signifie que, sur l'espace V_α, l'hamiltonien $-H_1^2/U$ est celui qui s'approche le plus du véritable hamiltonien $H_1 + H_0$ agissant sur V_0. Autrement dit, au premier ordre en $1/U$, $H_0 + H_1$ est équivalent à $-H_1^2/U$ par transformation unitaire dans V_0. D'après l'expression pour H_1 avec sauts aux premiers voisins

$$H_1 = -t\sum_{\langle ij\rangle,\sigma}(c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) \tag{2.23}$$

On écrit donc

$$H_1^2 = t^2\sum_{\langle ij\rangle,\sigma}\sum_{\langle kl\rangle,\sigma'}(c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma})(c_{k,\sigma'}^\dagger c_{l,\sigma'} + c_{l,\sigma'}^\dagger c_{k,\sigma'}) \tag{2.24}$$

Pour que $H_1^2|\alpha\rangle$ ait une composante non nulle dans V_α, il faut que $\langle ij\rangle = \langle kl\rangle$. Par conséquent nous avons effectivement, sur V_α,

$$\begin{aligned}H_1^2 = t^2\sum_{\langle ij\rangle,\sigma\sigma'}\Big\{&c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}c_{i,\sigma'}^\dagger c_{j,\sigma'} + c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}c_{j,\sigma'}^\dagger c_{i,\sigma'}\\ &+c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}c_{i,\sigma'}^\dagger c_{j,\sigma'} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}c_{j,\sigma'}^\dagger c_{i,\sigma'}\Big\}\end{aligned} \tag{2.25}$$

Les premier et quatrième termes ont une action nulle dans V_α: ils annihilent deux particules au même site. Le deuxième terme est

$$c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}c_{j,\sigma'}^\dagger c_{i,\sigma'} = -c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma'}c_{j,\sigma'}^\dagger c_{j,\sigma} + \delta_{\sigma\sigma'}c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma'} \tag{2.26}$$

et le troisième est obtenu par la substitution $(i \leftrightarrow j)$. Le premier terme ci-haut est égal à $-\frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j)$ alors que le second ne fait que contribuer au potentiel chimique. On peut donc finalement écrire l'hamiltonien effectif sur V_α:

$$H_{\text{eff.}} = \frac{4t^2}{U}\sum_{\langle ij\rangle}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \tag{2.27}$$

On obtient donc le modèle de Heisenberg antiferromagnétique, tel qu'annoncé. Une contribution provenant d'une correction du deuxième ordre comme celle-ci et apportant une contribution positive à J est un terme dit de *super-échange*.

En général, les termes d'échange et de super-échange sont en compétition, le plus fort décidant si l'hamiltonien de basse énergie sera ferromagnétique ou antiferromagnétique.

3 Ondes de spin

Écrivons le modèle de Heisenberg comme suit :

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} \left\{ S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} S_i^+ S_j^- + \frac{1}{2} S_i^- S_j^+ \right\} \tag{3.1}$$

où $S^{\pm} = S^x \pm i S^y$. Nous avons montré dans la section précédente comment ce modèle peut décrire les excitations de basse énergie dans un système d'électrons fortement corrélés dans lequel chaque site est occupé par un électron. Dans ce cas la représentation de spin $\frac{1}{2}$ est utilisée. Cependant ce modèle s'applique aussi à des systèmes ayant un spin plus grand à chaque site et sert de base à la théorie du magnétisme. Dans ce qui suit nous supposerons que les opérateurs de spin appartiennent à une représentation générale de spin s. Notons que cet hamiltonien conserve le spin total

$$\mathbf{S}_{\text{tot.}} = \sum_i \mathbf{S}_i \tag{3.2}$$

ce qui est caractéristique d'un système sans interactions spin-orbite. L'hamiltonien conserve aussi l'impulsion, modulo bien sûr un vecteur du réseau réciproque.

Notons qu'une base de l'espace des états de ce modèle est obtenue en spécifiant la valeur de S_i^z à chaque site. Dans un système à une dimension ou *chaîne de spins*, cela revient à utiliser comme états de base les chaînes de projections

$$|\ldots s_1^z, s_2^z, s_3^z, \ldots\rangle \tag{3.3}$$

3.1 Cas ferromagnétique

Étudions d'abord le cas ferromagnétique ($J < 0$). L'état fondamental de H est alors obtenu quand tous les spins sont parallèles. Cet état est plusieurs fois dégénéré. En particulier, l'état de base $|s_i^z = s\rangle$ est un état fondamental d'énergie $E_0 = NJs^2$ et de projection $S_{\text{tot.}}^z = Ns$, où N est le nombre de sites. Comme $\mathbf{S}_{\text{tot.}}$ commute avec H et comme cet état appartient à la représentation de spin maximal ($S_{\text{tot.}} = Ns$), il y a $2Ns + 1$ états de même énergie E_0. Tous ces états ont une impulsion nulle.

État à une onde de spin en une dimension

Ce qui nous intéresse ici sont les premiers états excités du système. Il est intuitivement clair que ces états ne différeront des états fondamentaux que par un ou quelques spins qui ne sont pas parallèles aux autres. D'autre part, comme l'impulsion est conservée, ces états excités devront avoir une impulsion bien définie : ce seront des combinaisons linéaires d'états ayant chacun une projection de spin réduite à un site donné. Plus explicitement, appelons $|i\rangle$ un état de la chaîne de spins dans lequels tous les sites ont une projection $S_j^z = s$ sauf au site i où $S_i^z = s - 1$. L'action de H sur cet état est (nous avons soustrait E_0 de H):

$$\begin{aligned} H|i\rangle &= J\left\{(2s(s-1) - 2s^2)|i\rangle + s|i+1\rangle + s|i-1\rangle\right\} \\ &= Js(|i-1\rangle - 2|i\rangle + |i+1\rangle) \end{aligned} \tag{3.4}$$

Cela nous incite à considérer des combinaisons linéaires du type suivant :

$$\begin{aligned} |k\rangle &= c \sum_r \mathrm{e}^{-ikrc} |r\rangle \\ |r\rangle &= \int_{\text{Z.B.}} (\mathrm{d}k)\ \mathrm{e}^{ikrc} |k\rangle \end{aligned} \tag{3.5}$$

où a_0 est le pas de réseau, c'est-à-dire la taille de la maille élémentaire. On vérifie sans peine que

$$H|k\rangle = 2Js[\cos(ka_0) - 1]|k\rangle \tag{3.6}$$

Nous avons donc un ensemble d'états propres d'impulsion k et d'énergie

$$E(k) = 2|J|s[1 - \cos(ka_0)] \tag{3.7}$$

Aux faibles impulsions la relation de dispersion est quadratique : $E(k) \approx s|J|a_0^2k^2$. Ces états sont appelés *ondes de spin*.

Une onde de spin est un exemple de *mode collectif*, c'est-à-dire un état qui décrit non pas le mouvement d'un électron en particulier, mais le mouvement collectif de l'ensemble des électrons (ici, de leurs spins). L'onde de spin a les caractéristiques d'une particule, mais cette particule est radicalement différente de la particule sous-jacente sur laquelle elle est construite (l'électron). En fait, nous allons constater que cette particule est un boson, comme tous les modes collectifs.

Un fait important est qu'il n'y a pas de bande interdite (*gap*) entre l'état fondamental et le premier état excité. Il s'agit ici d'une manifestation particulière du *théorème de Goldstone*, qui stipule que si le fondamental d'un système n'est pas invariant par une symétrie continue (ici, la symétrie de rotation dans l'espace des spins), alors les états excités ont une relation de dispersion $E(\mathbf{k})$ qui touche à l'état fondamental à une valeur précise de $\mathbf{k}$ (ici, $\mathbf{k} = 0$). Le mode collectif associé est appelé *mode de Goldstone*.

Transformation de Holstein-Primakov

Même si nous avons montré qu'une onde de spin est un état propre de l'hamiltonien, cela ne veut pas nécessairement dire que deux ondes de spin ensemble forment un état propre. Pour mieux étudier ces états et pour préciser ce qu'on entend par 'deux ondes de spins', il est nécessaire de procéder à la *transformation de Holstein-Primakov*. On exprime les composantes du moment cinétique à l'aide d'un oscillateur harmonique a_i comme suit :

$$\begin{aligned} S_i^z &= s - a_i^\dagger a_i \\ S_i^+ &= \sqrt{2s - a_i^\dagger a_i}\; a_i \\ S_i^- &= a_i^\dagger \sqrt{2s - a_i^\dagger a_i} \end{aligned} \tag{3.8}$$

L'oscillateur a_i défini à chaque site obéit à la relation de commutation usuelle $[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$. Pour démontrer la légitimité de cette transformation, il faut démontrer que les relations de commutation du moment cinétique sont reproduites, ce qui se fait aisément. On voit que l'état fondamental $|0\rangle$ des oscillateurs, tel que $a_i|0\rangle = 0$, coïncide avec l'état fondamental $S_i^z = s$ du système. L'état $|i\rangle$ décrit plus haut coïncide avec l'état $a_i^\dagger|0\rangle$. Ce qu'il y a de particulier dans cette transformation c'est que les états tels que $n_i > 2s$ pour un ou plusieurs sites (ici $n_i = a_i^\dagger a_i$) sont découplés des autres. L'espace de Hilbert effectif n'est donc pas équivalent à l'espace de Hilbert d'un ensemble d'oscillateurs harmoniques.

L'expression de l'hamiltonien H en fonction des oscillateurs est compliquée en raison des racines carrées. Si on développe ces racines carrées en série, on obtient une décomposition $H = H_0 + H_1$ où H_0 est purement quadratique dans les a_i alors que H_1 contient des termes de degré supérieur à 2 représentant des interactions entre les oscillateurs. Ce développement est d'autant plus sûr que

le spin s est grand. Le fait de ne retenir que H_0 constitue donc une approximation dite de *spin grand*. L'hamiltonien 'libre' H_0 est, modulo une constante,

$$H_0 = s|J|Z \sum_i a_i^\dagger a_i - s|J| \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i) \tag{3.9}$$

où Z est le nombre de coordination (le nombre de premiers voisins). Cet hamiltonien peut être diagonalisé par transformation de Fourier sur réseau. On définit

$$\begin{aligned} a(\mathbf{k}) &= \sqrt{V_\Gamma} \sum_{\mathbf{n}\in\Gamma} \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} a_\mathbf{n} \\ a_\mathbf{n} &= \sqrt{V_\Gamma} \int_{\text{Z.B.}} (\mathrm{d}^3k)\ \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} a(\mathbf{k}) \end{aligned} \tag{3.10}$$

Nous avons modifié un peu notre notation pour la rendre plus explicite vis-à-vis du réseau : les indices de site sont maintenant des vecteurs du réseau Γ. Nous avons la relation de commutation

$$[a(\mathbf{q}), a^\dagger(\mathbf{p})] = (2\pi)^d \delta_{\Gamma^*}(\mathbf{q}-\mathbf{p}) \tag{3.11}$$

On montre sans peine que

$$\begin{aligned} \sum_\mathbf{n} a_\mathbf{n}^\dagger a_\mathbf{n} &= \int_{\text{Z.B.}} (\mathrm{d}^3k)\ a^\dagger(\mathbf{k}) a(\mathbf{k}) \\ \sum_{\langle \mathbf{nm} \rangle} a_\mathbf{n}^\dagger a_\mathbf{m} &= \frac{1}{2} \sum_\mathbf{e} \int_{\text{Z.B.}} (\mathrm{d}^3k)\ \mathrm{e}^{i\mathbf{e}\cdot\mathbf{k}} a^\dagger(\mathbf{k}) a(\mathbf{k}) \end{aligned} \tag{3.12}$$

où les Z vecteurs $\mathbf{e}$ relient un site à ses premiers voisins. Pour un réseau cubique avec vecteurs de base $\mathbf{e}_i$, $Z = 6$ et les six vecteurs en question sont $\pm\mathbf{e}_i$. Si on définit

$$\gamma(\mathbf{k}) = \frac{1}{Z} \sum_\mathbf{e} \mathrm{e}^{i\mathbf{e}\cdot\mathbf{k}} = \frac{1}{Z} \sum_\mathbf{e} \cos(\mathbf{e}\cdot\mathbf{k}) \tag{3.13}$$

alors l'hamiltonien libre devient

$$H_0 = s|J|Z \int_{\text{Z.B.}} (\mathrm{d}^3k)\ [1-\gamma(\mathbf{k})] a^\dagger(\mathbf{k}) a(\mathbf{k}) \tag{3.14}$$

Les ondes de spin ont donc la relation de dispersion suivante :

$$E(\mathbf{k}) = s|J|Z[1-\gamma(\mathbf{k})] \tag{3.15}$$

ce qui est une généralisation du résultat obtenu précédemment pour la chaîne. Par exemple, sur un réseau cubique avec pas de réseau a_0, on trouve

$$\gamma(\mathbf{k}) = \tfrac{1}{3}\big(\cos(k_x a_0) + \cos(k_y a_0) + \cos(k_z a_0)\big) \qquad \text{(3D)} \tag{3.16}$$

En une dimension, on trouve plutôt

$$\gamma(\mathbf{k}) = \cos(k a_0) \qquad \text{(1D)} \tag{3.17}$$

Les relations de dispersion correspondantes sont

$$E(\mathbf{k}) = \begin{cases} 4s|J|\left(\sin^2\dfrac{k_x a_0}{2} + \sin^2\dfrac{k_y a_0}{2} + \sin^2\dfrac{k_z a_0}{2}\right) & \text{(3D)} \\ 4s|J|\sin^2\dfrac{k a_0}{2} & \text{(1D)} \end{cases} \tag{3.18}$$

On remarque que la relation de dispersion est quadratique aux faibles impulsions. Par exemple, sur un réseau cubique,

$$E(\mathbf{k}) \approx s|J|a_0^2\mathbf{k}^2 \qquad \text{(3D)} \tag{3.19}$$

Le formalisme d'Holstein-Primakov nous permet donc de définir des états à plusieurs ondes de spin. Cependant, même si ceux-ci sont des états propres de H_0, ils ne sont pas des états propres de H: seuls les états à une onde de spin le sont. Les interactions contenues dans H_1 ont un effet attracteur sur les ondes de spins et il peut se former des *états liés* ressemblant à une superposition de deux ondes de spins et dont l'énergie est inférieure à la somme des énergies des ondes de spins. Ces états sont présents pour s petit (interactions fortes) mais disparaissent quand s est suffisamment grand.

3.2 Cas antiferromagnétique

Dans le cas antiferromagnétique ($J > 0$) la situation est plus compliquée. En fait, l'état fondamental de l'hamiltonien de Heisenberg nous est inconnu, sauf dans le cas de la chaîne de spin $\frac{1}{2}$ [H. Bethe, 1931]. En effet, considérons la modification suivante à l'hamiltonien ($J > 0$):

$$H = J\sum_{\langle ij\rangle}\left\{S_i^z S_j^z + \frac{1}{2}\gamma(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)\right\} \tag{3.20}$$

Nous avons ajouté un paramètre d'anisotropie γ dans l'espace des spins. Dans la limite $\gamma \to 0$ on trouve l'hamiltonien d'Ising, dont l'état fondamental antiferromagnétique est l'*état de Néel*, dans lequel les spins alternent d'un site à l'autre : pour une chaîne, on aurait $S_i^z = (-s)^i$. Cependant, cet état cesse d'être un état propre de H quand $\gamma \neq 0$, car les termes $S_i^+ S_j^-$ et $S_i^- S_j^+$ modifient l'état de Néel.

Même si une solution exacte a été trouvée pour l'état fondamental et les premiers états excités de la chaîne de Heisenberg à spin $\frac{1}{2}$, nous ne l'étudierons pas, en raison bien sûr de sa complexité mais aussi parce que nous voulons donner un traitement qui, quoiqu'approximatif, s'applique à toutes les valeurs du spin et aux dimensions supérieures. Même si l'état de Néel n'est pas l'état fondamental exact de H, on estime qu'il s'en approche suffisamment pour servir de point de départ à une approximation de Holstein-Primakov. L'état de Néel se trouve à partager le réseau Γ en deux sous-réseaux : $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2$. Les deux sous-réseaux sont identiques mais intercalés[1]. Sur chacun des sous-réseaux les spins sont parallèles dans l'état de Néel. L'hamiltonien de Heisenberg peut s'écrire

$$H = J\sum_{\mathbf{n}\in\Gamma_1}\mathbf{S}_{\mathbf{n}}\cdot\sum_{\mathbf{e}}\mathbf{S}_{\mathbf{n}+\mathbf{e}} \tag{3.21}$$

où les spins du facteur de droite appartiennent tous à Γ_2.

[1] Une telle décomposition n'a pas de sens pour un réseau triangulaire ou hexagonal. Nous nous limiterons pour simplifier les choses au réseaux linéaire (1D), carré (2D) ou cubique (3D): ce sont les réseaux dits *bipartites*.

On introduit maintenant deux ensembles d'oscillateurs : $a_{\mathbf{n}}$ et $b_{\mathbf{n}}$. Les $a_{\mathbf{n}}$ sont définis comme dans le cas ferromagnétique, en fonction des spins du réseau Γ_1. Par contre, les $b_{\mathbf{n}}$ sont définis ainsi

$$\begin{aligned} S^z_{\mathbf{m}} &= -s + b^\dagger_{\mathbf{m}}\, b_{\mathbf{m}} \\ S^+_{\mathbf{m}} &= b^\dagger_{\mathbf{m}} \sqrt{2s - b^\dagger_{\mathbf{m}}\, b_{\mathbf{m}}} \\ S^-_{\mathbf{m}} &= \sqrt{2s - b^\dagger_{\mathbf{m}} b_{\mathbf{m}}}\; b_{\mathbf{m}} \end{aligned} \tag{3.22}$$

Encore une fois les relations de commutation du moment cinétique sont reproduites par la commutation $[b_{\mathbf{n}}, b^\dagger_{\mathbf{m}}] = \delta_{\mathbf{n},\mathbf{m}}$, sauf que cette fois c'est l'état de spin $-s$ qui sert de vide. L'état de Néel est donc caractérisé par la condition $a_{\mathbf{n}}|0\rangle = b_{\mathbf{n}}|0\rangle = 0$.

L'hamiltonien exprimé en fonction des oscillateurs comporte encore des termes quadratiques formant une partie libre H_0, plus une partie d'interaction H_1 contenant des termes de degrés supérieurs. À une constante près, on a

$$H_0 = sJZ \left\{ \sum_{\mathbf{n}\in\Gamma_1} a^\dagger_{\mathbf{n}} a_{\mathbf{n}} + \sum_{\mathbf{n}\in\Gamma_2} b^\dagger_{\mathbf{n}} b_{\mathbf{n}} \right\} + sJ \sum_{\mathbf{n}\in\Gamma_1} \sum_{\mathbf{e}} \left(a^\dagger_{\mathbf{n}} b^\dagger_{\mathbf{n}+\mathbf{e}} + a_{\mathbf{n}} b_{\mathbf{n}+\mathbf{e}} \right) \tag{3.23}$$

Encore une fois nous allons définir une transformée de Fourier :

$$\begin{aligned} b(\mathbf{k}) &= \sqrt{V_\Gamma} \sum_{\mathbf{n}\in\Gamma} \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} b_{\mathbf{n}} \\ b_{\mathbf{n}} &= \sqrt{V_\Gamma} \int_{\text{Z.B.}} (\mathrm{d}^3 k)\; \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} b(\mathbf{k}) \end{aligned} \tag{3.24}$$

Notons la différence de signe dans la phase par rapport à la définition de $a(\mathbf{k})$. La zone de Brillouin est ici celle du réseau réciproque de Γ_1 (ou Γ_2) et non pas de Γ; elle est donc deux fois plus petite. Par contre à chaque valeur de $\mathbf{k}$ on associe deux oscillateurs. Le nombre de degrés de liberté est donc le même qu'auparavant. En fonction de ces opérateurs l'hamiltonien libre devient

$$H_0 = sJZ \int_{\text{Z.B.}} (\mathrm{d}^3 k) \left\{ a^\dagger(\mathbf{k}) a(\mathbf{k}) + b^\dagger(\mathbf{k}) b(\mathbf{k}) + \gamma(\mathbf{k}) [a^\dagger(\mathbf{k}) b^\dagger(\mathbf{k}) + a(\mathbf{k}) b(\mathbf{k})] \right\} \tag{3.25}$$

Force nous est de constater que la diagonalisation n'est pas terminée, puisque l'état fondamental de cet hamiltonien n'est manifestement pas le vide $|0\rangle$ des oscillateurs. Ceci est rassurant, puisque nous savons que l'état de Néel n'est pas l'état fondamental de H.

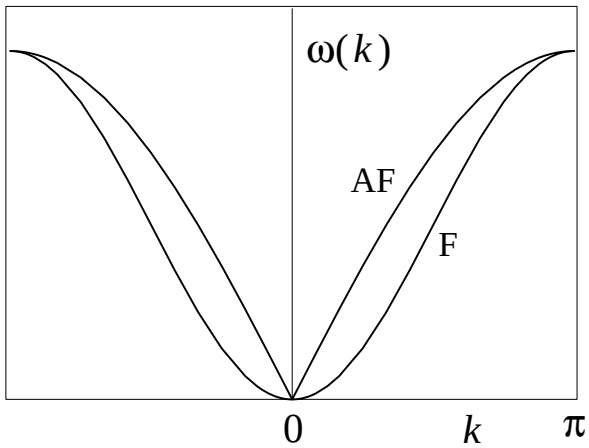


Figure 3.1. Relations de dispersion des ondes de spin en dimension 1, dans les cas ferromagnétique (F) et antiferromagnétique (AF).

Nous souhaitons ramener cet hamiltonien à une forme qui ne contient que des opérateurs de nombre ($a^\dagger a$, etc.) pour pouvoir identifier les quanta des ondes de spin. Ceci ne peut se faire avec les oscillateurs $a(\mathbf{k})$ et $b(\mathbf{k})$, mais est possible à l'aide de nouveaux oscillateurs obtenus par une *transformation de Bogolioubov*:

$$\begin{pmatrix} \alpha(\mathbf{k}) \\ \beta^\dagger(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = M(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} a(\mathbf{k}) \\ b^\dagger(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \tag{3.26}$$

où $M(\mathbf{k})$ est une matrice 2 par 2 dépendant de $\mathbf{k}$. Pour simplifier la notation, considérons une transformation

$$\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \tag{3.27}$$

où les c_i obéissent aux relations de commutation

$$[c_i, c_j] = 0 \qquad\qquad [c_i, c_j^\dagger] = (\sigma_3)_{ij} \tag{3.28}$$

Ceci s'applique effectivement au cas qui nous occupe. Si on désire que les d_i satisfassent aux mêmes relations, c'est-à-dire qu'ils soient des oscillateurs, la matrice M doit respecter la contrainte $M\sigma_3 M^\dagger = \sigma_3$. En effet,

$$[d_i, d_j^\dagger] = M_{ik} M_{jl}^* [c_k, c_l^\dagger] = M_{ik} M_{jl}^* (\sigma_3)_{kl} = (M\sigma_3 M^\dagger)_{ij} \tag{3.29}$$

Une solution à cette contrainte est

$$M(\theta) = \begin{pmatrix} \cosh\theta & \sinh\theta \\ \sinh\theta & \cosh\theta \end{pmatrix} \tag{3.30}$$

(cette solution n'est pas unique, car d_1 et d_2 peuvent être multipliés par un facteur de phase). On cherche donc un 'angle' $\theta_\mathbf{k}$ tel que H soit simple en fonction des $\alpha(\mathbf{k})$ et des $\beta(\mathbf{k})$. En définissant les doublets $c(\mathbf{k}) = (a(\mathbf{k}), b^\dagger(\mathbf{k}))$ et $d(\mathbf{k}) = (\alpha(\mathbf{k}), \beta^\dagger(\mathbf{k}))$ on peut écrire l'hamiltonien sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} H &= sJZ \int_{\text{Z.B.}} (\mathrm{d}^3k)\ c^\dagger(\mathbf{k}) L(\mathbf{k}) c(\mathbf{k}) \\ &= sJZ \int_{\text{Z.B.}} (\mathrm{d}^3k)\ d^\dagger(\mathbf{k}) D(\mathbf{k}) d(\mathbf{k}) \end{aligned} \tag{3.31}$$

où les matrices L et D sont définies par

$$L(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 1 & \gamma(\mathbf{k}) \\ \gamma(\mathbf{k}) & 1 \end{pmatrix} \qquad\qquad L(\mathbf{k}) = M^\dagger(\theta_\mathbf{k}) D(\mathbf{k}) M(\theta_\mathbf{k}) \tag{3.32}$$

(ici $M^\dagger = M$). Il nous reste à trouver $\theta(\mathbf{k})$ de sorte que $D(\mathbf{k})$ soit diagonal. Notons tout d'abord que les matrices $M(\theta)$ possèdent une règle de multiplication simple, en vertu des formules d'addition des fonctions hyperboliques :

$$M(\theta_1) M(\theta_2) = M(\theta_1 + \theta_2) \tag{3.33}$$

D'autre part, la matrice $L(\mathbf{k})$ peut s'écrire ainsi :

$$L(\mathbf{k}) = \sqrt{1 - \gamma^2(\mathbf{k})} M(\eta_\mathbf{k}) \tag{3.34}$$

où

$$\sinh\eta_{\mathbf{k}} = \frac{\gamma(\mathbf{k})}{\sqrt{1-\gamma^2(\mathbf{k})}} \quad , \quad \cosh\eta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{1-\gamma^2(\mathbf{k})}} \quad , \quad \tanh\eta_{\mathbf{k}} = \gamma(\mathbf{k}) \tag{3.35}$$

En isolant $D(\mathbf{k})$, on trouve donc

$$D(\mathbf{k}) = M^{-1}(\theta_{\mathbf{k}})L(\mathbf{k})M^{-1}(\theta_{\mathbf{k}}) = \sqrt{1-\gamma^2(\mathbf{k})}M(-2\theta_{\mathbf{k}}+\eta_{\mathbf{k}}) \tag{3.36}$$

Cette matrice est diagonale si l'argument de M est nul, c'est-à-dire si $\eta_{\mathbf{k}} = 2\theta_{\mathbf{k}}$. On trouve donc la condition

$$\theta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}\tanh^{-1}\gamma(\mathbf{k}) \tag{3.37}$$

(notons que $-1 \geq \gamma(\mathbf{k}) \leq 1$ d'après sa définition, de sorte qu'une solution $\theta_{\mathbf{k}}$ existe toujours). L'hamiltonien libre prend la forme suivante :

$$H_0 = sJZ\int_{\text{Z.B.}}(\mathrm{d}^3k)\ \sqrt{1-\gamma^2(\mathbf{k})}\ \left\{\alpha^\dagger(\mathbf{k})\alpha(\mathbf{k}) + \beta(\mathbf{k})\beta^\dagger(\mathbf{k})\right\} + \text{const.} \tag{3.38}$$

En commutant les opérateurs du deuxième terme, on trouve

$$H_0 = sJZ\int_{\text{Z.B.}}(\mathrm{d}^3k)\ \sqrt{1-\gamma^2(\mathbf{k})}\ \left\{\alpha^\dagger(\mathbf{k})\alpha(\mathbf{k}) + \beta^\dagger(\mathbf{k})\beta(\mathbf{k})\right\} + \text{const.} \tag{3.39}$$

ce qui est bien la forme attendue de l'hamiltonien d'un ensemble d'oscillateurs harmoniques découplés. L'état fondamental $|\Omega\rangle$ est défini par les relations

$$\alpha(\mathbf{k})|\Omega\rangle = 0 \qquad \beta(\mathbf{k})|\Omega\rangle = 0 \tag{3.40}$$

Les opérateurs $\alpha^\dagger(\mathbf{k})$ et $\beta^\dagger(\mathbf{k})$ créent des excitations à partir du 'nouveau vide' $|\Omega\rangle$. Ces excitations ont la relation de dispersion suivante :

$$E(\mathbf{k}) = sJZ\sqrt{1-\gamma^2(\mathbf{k})} \tag{3.41}$$

En particulier, en une dimension, on trouve

$$E(k) = 2sJ\sin(ka_0) \tag{3.42}$$

Aux petits vecteurs d'onde[2] cette relation de dispersion est linéaire, à la différence du cas ferromagnétique. En particulier, en trois dimensions sur un réseau cubique avec pas de réseau a_0, on trouve

$$\sqrt{1-\gamma^2(\mathbf{k})} \approx \frac{1}{\sqrt{3}}a_0|\mathbf{k}| \qquad (3D) \tag{3.43}$$

En une dimension, cette expression est remplacée par

$$\sqrt{1-\gamma^2(k)} \approx a_0|k| \qquad (1D) \tag{3.44}$$

Les ondes de spin antiferromagnétiques viennent donc en deux polarisations (α et β) ayant des énergies identiques. On calcule sans peine que le spin total $S^z_{\text{tot.}}$ est donné par

$$S^z_{\text{tot.}} = \int_{\text{Z.B.}}(\mathrm{d}^3k)\ \left\{\beta^\dagger(\mathbf{k})\beta(\mathbf{k}) - \alpha^\dagger(\mathbf{k})\alpha(\mathbf{k})\right\} \tag{3.45}$$

Le ondes de spin de polarisation β (α) ont donc une valeur positive (négative) de S^z alors que $S^z = 0$ dans le vide $|\Omega\rangle$. On constate que les ondes de spin ont un spin égal à un, quelle que soit la valeur de s.

[2] Notons ici que le vecteur d'onde $\mathbf{k} = 0$ appartient au réseau réciproque du sous-réseau Γ_1. La zone de Brillouin associée à Γ (le réseau complet) est deux fois plus grande que celle associée à Γ_1. En fait, le vecteur $\mathbf{k} = 0$, reporté dans la zone de Brillouin de Γ, correspond à un vecteur d'onde $\mathbf{k}_{AF} = (\pi,\pi,\pi)/a_0$ (sur un réseau cubique), appelé *vecteur d'onde antiferromagnétique*.

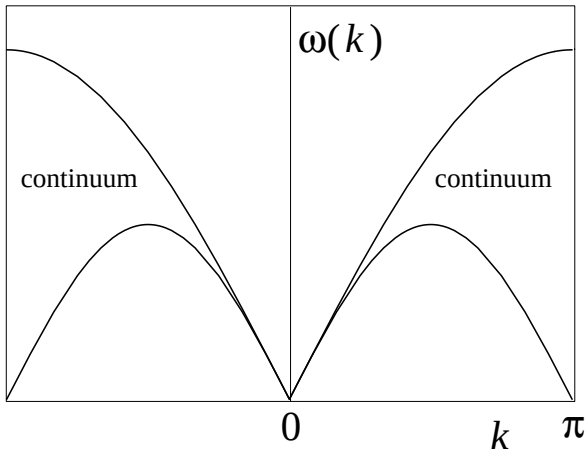


Figure 3.2. Relations de dispersion des états excités de la chaîne de spin $\frac{1}{2}$.

Solution exacte en $d = 1$
La théorie des ondes de spins expliquée ci-haut ne fonctionne pas en dimension 1 et le désaccord est flagrant avec les petites valeurs du spin ($s = \frac{1}{2}, 1$). L'état fondamental de la chaîne de spin $\frac{1}{2}$ a été obtenu par H. Bethe en 1931, à l'aide d'une technique qui est depuis connue sous le nom d'*ansatz de Bethe*. Cet état fondamental ne présente pas d'ordre à longue portée et donc le point de départ de la méthode de Holstein-Primakoff est complètement injustifié dans ce cas. Les états excités ont été obtenus plus tard et c'est assez récemment qu'une vision plus claire du spectre a émergé [Fadeev et Takhtajan, 1981]. Ces états excités, dans une chaîne qui comprend un nombre pair de sites, sont formés d'un nombre pair de *spinons*. Ces spinons ont la relation de dispersion suivante :

$$\varepsilon(k) = \frac{1}{2}\pi \sin k \qquad 0 \leq k \leq \pi \quad \text{et} \quad J = 1 \tag{3.46}$$

Chacun de ces spinons porte un spin $\frac{1}{2}$, mais comme les états physique comportent un nombre pair de spinons, leur spin est entier. Ils forment de plus un continuum d'états, pour une valeur donnée de k (cf. figure).

Gap de Haldane
Pour sa part, la chaîne de spin $s = 1$ ne s'est pas prêtée jusqu'ici à une solution exacte. On sait cependant, grâce à divers moyens (correspondance avec la théorie des champs et méthodes numériques) que l'état fondamental est désordonné et qu'il existe une bande interdite (ou *gap*) entre le fondamental et le premier état excité. D'après les plus récentes simulations numériques, ce gap est égal à $\Delta = 0,41049(2)J$. C'est Haldane qui a conjecturé (1983) que les chaînes antiferromagnétiques de spin entier ont un tel gap, alors que les chaînes de spin demi-entier n'en ont pas.

Problème 3.1 *Fonctions de Bloch dans un réseau de fonctions delta*
Considérons un potentiel périodique sur un réseau unidimensionnel :

$$V(x) = U \sum_{n \in \mathbb{Z}} \delta(x - na)$$

où U est une constante et a est le pas de réseau. On s'intéresse aux bandes d'énergie d'une particule de masse m se déplaçant dans un tel potentiel.

a) Montrez que les bandes d'énergie sont spécifiées par

$$E(k) = \frac{\hbar^2 p^2}{2m}$$

où p est un nombre d'onde déterminé en fonction de k par l'équation transcendentale suivante :

$$\cos(ka) - \cos(pa) = \gamma \frac{\sin(pa)}{pa} \qquad \gamma = \frac{mUa}{\hbar^2} \tag{3.47}$$

Pour chaque valeur de ka dans l'intervalle $[-\pi, \pi]$, cette équation implicite possède une infinité de solutions pour p qui déterminent les différentes bandes d'énergie. Indice : trouvez la fonction de Bloch $\varphi_k(x)$ en solutionnant l'équation de Schrödinger. La solution se trouve morceau par morceau (c'est-à-dire de 0 à a, ensuite de a à $2a$, etc.) en demandant (i) la périodicité $\varphi(x+a) = \mathrm{e}^{ika}\varphi(x)$ (ii) la continuité de φ et (iii) la discontinuité de $\partial\varphi/\partial x$ à $x = na$, par la bonne quantité.

b) Supposez que $\gamma \ll 1$ (liaisons faibles). Montrez que le 'gap' entre la première et la deuxième bande est donné par $\Delta \approx 2\hbar^2\gamma/(ma^2)$. Indice : partez de (3.47) et posez $p = k + \delta/a$ où δ est petit. Développez ensuite au premier ordre non trivial en δ, à la valeur de k où se situe le gap. Demandez-vous quelles seraient les bandes et les valeurs de p si U était nul.

c) Supposez, au contraire, que $\gamma \gg 1$ (liaisons fortes). La première bande est alors très étroite. Obtenez la dispersion $E(k)$ de la première bande dans cette limite et calculez sa largeur. Indice : si $\gamma \gg 1$, alors il est clair par l'équation (3.47) que pa est proche de $\pm\pi$. posez alors $pa = \pi - \theta$ en supposant θ petit et solutionnez au premier ordre en θ.

Problème 3.2 *Modèle de Hubbard sur un réseau carré*

Considérons le modèle de Hubbard sur un réseau carré en dimension 2:

$$H = H_0 + V \qquad H_0 = t \sum_{\langle \mathbf{n},\mathbf{m}\rangle} \sum_{\sigma} (b^\dagger_{\mathbf{n},\sigma} b_{\mathbf{m},\sigma} + \text{c.h.}) \qquad V = U \sum_{\mathbf{n}} n_{\mathbf{n},\uparrow} n_{\mathbf{n},\downarrow}$$

la première somme est prise sur les paires de sites qui sont voisins immédiats. On notera le pas de réseau a. La notation choisie (H_0 et V) suggère qu'on supposera que $U \ll t$ (couplage faible). $n_{\mathbf{n},\sigma} = b^\dagger_{\mathbf{n},\sigma} b_{\mathbf{n},\sigma}$ est l'opérateur du nombre d'électrons de spin σ au site $\mathbf{n}$.

a) En supposant tout d'abord $U = 0$, obtenez la relation de dispersion $E(\mathbf{k})$ pour H_0. Tracez la surface de Fermi pour (i) un remplissage très petit, (ii) demi-remplissage et (iii) un remplissage presque complet.

b) Calculez la valeur moyenne $\langle n_{\mathbf{n},\sigma}\rangle$ dans l'état fondamental de H_0, à demi-remplissage. Un nombre simple est demandé.

c) Calculez la première correction à l'énergie (par site) du fondamental de H_0 induite par V.

Problème 3.3 *Ondes de spin dans un matériau anisotrope*

Considérons un matériau magnétique sur un réseau cubique, décrit par le modèle de Heisenberg avec couplage au plus proches voisins. Les vecteurs de base du réseau sont mutuellement perpendiculaires et notés $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ et $\mathbf{c}$ pour les axes a, b et c respectivement. L'interaction d'échange est de type ferromagnétique le long de l'axe c (avec une constante d'échange négative $-J_\parallel$ ($J_\parallel > 0$), alors qu'elle est de type antiferromagnétique (avec une constante d'échange positive $J_\perp$) le long des deux autres axes. L'hamiltonien peut donc s'écrire de la manière suivante :

$$H = \sum_{\langle \mathbf{mn}\rangle} J_{\mathbf{mn}} \mathbf{S}_{\mathbf{m}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{n}}$$

où $J_{\mathbf{mn}} = -J_\parallel$ si $\mathbf{m} - \mathbf{n} = \pm\mathbf{c}$ et $J_{\mathbf{mn}} = J_\perp$ si $\mathbf{m} - \mathbf{n} = \pm\mathbf{a}$ ou $\mathbf{m} - \mathbf{n} = \pm\mathbf{b}$.

Expliquer en détail la procédure à suivre pour décrire le spectre des ondes de spin dans ce système, à l'aide de la transformation de Holstein-Primakoff. Ne perdez pas votre temps en calculs trop longs : consacrez-le plutôt à une description des étapes du calcul.

Problème 3.4 *Aimantation alternée*

Dans un antiferroaimant en champ magnétique nul, la projection du spin total $S^z_{\text{tot.}}$ est nulle dans l'état fondamental : $\langle S^z_{\text{tot.}}\rangle = 0$. Cependant, le spin total de chaque sous-réseau (l'aimantation alternée $\langle S^z_{\text{alt.}}\rangle$) n'est pas nécessairement nul.

a) Expliquez comment calculer cette quantité dans l'approximation linéaire (théorie des ondes de spin) et obtenez-en une expression en fonction d'une somme sur les modes d'onde de spin. Y a-t-il un mode particulier qui pose un problème?

b) Sur la base de cette expression, expliquez comment on peut s'attendre à ce qu'il n'y ait pas d'ordre antiferromagnétique à longue portée en dimension 1, contrairement aux dimensions supérieures.

Problème 3.5 *Transformation de Bogolioubov*

Considérez l'hamiltonien suivant :

$$H = \omega a^\dagger a + \gamma(a^2 + a^{\dagger 2}) \qquad [a, a^\dagger] = 1 \qquad |\gamma| < \frac{1}{2}\omega \qquad \omega > 0$$

a) Définissez un autre oscillateur b à l'aide d'une transformation de Bogolioubov et montrez que l'hamiltonien peut maintenant être exprimé comme

$$H = \omega' b^\dagger b + c \qquad [b, b^\dagger] = 1$$

où ω' et c sont des constantes. Exprimez ces constantes en fonction de ω et γ. Le signe de c est-il celui auquel on s'attend?

b) Soit $|0\rangle$ le vide de a (c.-à-d. l'état défini par la relation $a|0\rangle = 0$) et $|\Omega\rangle$ le fondamental de H. Quelle est le nombre moyen de quanta de a dans l'état $|\Omega\rangle$? Autrement dit, quel est la valeur moyenne $\langle\Omega|a^\dagger a|\Omega\rangle$?

c) Obtenez une expression explicite pour $|\Omega\rangle$ en fonction des états propres $|n\rangle$ de $a^\dagger a$, modulo une normalisation. Utilisez pour cela une relation de récurrence pour les coefficients du développement, obtenue en exprimant la condition $b|\Omega\rangle = 0$ en fonction de a et $a^\dagger$.

d) À quoi correspond cet hamiltonien quand on l'exprime en fonction de la coordonnée X et de l'impulsion P? Pourrait-on prédire la valeur de ω' dans ce langage sans trop d'effort? Peut-on mieux comprendre la contrainte $|\gamma| < \frac{1}{2}\omega$ dans ce langage?

e) Répétez les parties (a) et (d), cette fois avec l'hamiltonien suivant :

$$H = \omega a^\dagger a + i\hbar\omega\gamma(a^2 - a^{\dagger 2}) \qquad (|\gamma| < 2)$$

Problème 3.6 *Chaîne Ising dans un champ transverse*

L'hamiltonien d'une chaîne de spins $\frac{1}{2}$ couplés aux plus proches voisins par une interaction de type Ising et plongée dans un champ magnétique externe $\mathbf{h}$ est

$$H = -J\sum_n S^x_n S^x_{n+1} - \mathbf{h}\cdot\sum_n \mathbf{S}_n$$

où $\mathbf{S}_n = (S^x_n, S^y_n, S^z_n)$ est l'opérateur de spin associé au site n. Le couplage Ising est anisotrope, et suppose l'existence d'un axe privilégié dans le système physique qui inspire ce modèle. Si le champ magnétique est appliqué dans une direction perpendiculaire à cet axe, on peut ramener l'hamiltonien à la forme suivante (modulo une constante multiplicative):

$$H = -\sum_n \left\{\lambda\sigma_1(n)\sigma_1(n+1) + \sigma_3(n)\right\}$$

où $\sigma_i(n)$ est la i^e matrice de Pauli agissant sur l'espace des spins de l'électron du site n. On supposera que l'indice n va de $-N$ à N, pour un total de $2N+1$ sites. Dans ce problème nous allons trouver les états propres

de cet hamiltonien à l'aide d'une transformation de Wigner-Jordan, c'est-à-dire en démontrant l'équivalence de cet hamiltonien avec celui d'un ensemble de fermions ayant une relation de dispersion simple.

a) On définit l'opérateur c_n suivant :

$$c_n = \left\{ \exp\left(i\pi \sum_{j=-N}^{n-1} \sigma_+(j)\sigma_-(j) \right) \right\} \sigma_-(n) \qquad \sigma_\pm \equiv \frac{1}{2}(\sigma_1 \pm i\sigma_2)$$

En utilisant les propriétés de matrices de Pauli, montrez que cet opérateur peut aussi être écrit comme

$$c_n = \left\{ \prod_{j=-N}^{n-1} (-\sigma_3(j)) \right\} \sigma_-(n)$$

et que les relations d'anticommutation suivantes sont satisfaites :

$$\{c_n, c_m^\dagger\} = \delta_{nm} \qquad \{c_n, c_m\} = 0$$

Donc l'opérateur c_n est de type fermionique.

b) Montrez que l'hamiltonien peut s'écrire ainsi en fonction des opérateurs c_n, à une constante près :

$$H = -2\sum_n c_n^\dagger c_n - \lambda \sum_n (c_n^\dagger - c_n)(c_{n+1}^\dagger + c_{n+1})$$

c) On définit les transformées de Fourier discrètes habituelles

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{2N+1}} \sum_n \mathrm{e}^{ikn} c_n$$

où

$$k = 0, \pm\frac{2\pi}{2N+1}, \pm\frac{4\pi}{2N+1}, \ldots, \pm\frac{2\pi N}{2N+1}$$

Montrez que les opérateurs a_k satisfont aux mêmes relations d'anticommutation que les c_n, et que l'hamiltonien peut s'exprimer comme

$$H = \sum_{k>0} \left\{ -2(1+\lambda\cos k)(a_k^\dagger a_k + a_{-k}^\dagger a_{-k}) + 2i\lambda \sin k (a_k^\dagger a_{-k}^\dagger + a_k a_{-k}) \right\}$$

d) Diagonalisez cet hamiltonien en effectuant une transformation de Bogolioubov. En clair, trouvez une transformation de la forme suivante :

$$b_k = u_k a_k + i v_k a_{-k}^\dagger$$
$$b_{-k} = u_k a_{-k} - i v_k a_k^\dagger$$

où u_k et v_k sont des constantes réelles choisies de telle façon que l'hamiltonien ait la forme

$$H = \sum_k E_k b_k^\dagger b_k + \quad \text{constante}$$

Montrez que

$$E_k = 2\sqrt{1 + 2\lambda\cos k + \lambda^2}$$

et illustrez cette dépendance en k.

Problème 3.7 *Chaîne Heisenberg et transformation de Wigner-Jordan*

Considérez maintenant le modèle Heisenberg-Ising antiferromagnétique :

$$H = -J \sum_i (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \gamma S_i^z S_{i+1}^z)$$

a) En appliquant la transformation de Wigner-Jordan définie au problème précédent, montrez que

$$H = J \sum_i \left\{ c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i + \gamma(n_i - \frac{1}{2})(n_{i+1} - \frac{1}{2}) \right\}$$

b) Diagonalisez cet hamiltonien dans le cas $\gamma = 0$, ce qui correspond au modèle XY en dimension 1. Quel est l'état fondamental associé à une valeur nulle de $S_{\text{tot.}}^z$?

CHAPITRE 6

Bosons

La deuxième quantification, telle qu'exposée au chapitre 4, est une entreprise très formelle qui peut sembler peu naturelle. Dans cette approche, les particules en question (bosons ou fermions) ont une existence préalable et le formalisme se construit sur leurs propriétés. Cependant, dans plusieurs systèmes d'intérêt, ces particules identiques (en général des bosons apparaissant comme des *modes collectifs*) ne sont pas explicitement décrites par les variables dynamiques de départ. L'exemple le plus intuitif est celui des phonons, que nous étudierons ici dans son avatar le plus simple : la chaîne d'oscillateurs couplés. Ce chapitre a pour but de décrire la théorie générale des oscillateurs harmoniques couplés, et d'effectuer la limite continue vers une théorie du champ. Ceci nous permet de quantifier le champ électromagnétique et d'introduire la notion de photon. C'est dans ce chapitre que la notion de *quanta* devrait trouver tout son sens.

1 Oscillateurs couplés

1.1 Oscillateurs réels

Dans ce chapitre, nous allons nous intéresser à des systèmes physiques importants dont le lagrangien a la forme suivante :

$$L = \frac{1}{2}\sum_i \dot{q}_i^2 - \frac{1}{2}\sum_{i,j} q_i V_{ij} q_j \tag{1.1}$$

Les N variables q_i sont les coordonnées généralisées et V est une matrice symétrique. Cette matrice peut être diagonalisée par une matrice orthogonale : $V = RDR^t$, où $R^tR = 1$ et où les éléments de la matrice diagonale D sont notés ω_k^2 $(k = 1, \ldots, N)$. On suppose bien entendu que la matrice V est définie positive, de sorte que les quantités ω_k sont réelles.

Procédons à un changement de variables :

$$\theta = R^t q \quad \text{ou} \quad q_i = \sum_j R_{ij}\theta_j \tag{1.2}$$

Le lagrangien prend alors la forme suivante :

$$L = \frac{1}{2}\sum_n \left(\dot{\theta}_n^2 - \omega_n^2\theta_n^2\right) \tag{1.3}$$

Il s'agit maintenant d'une somme de lagrangiens découplés, chacun décrivant un oscillateur harmonique de masse unité et de fréquence ω_n. Le moment conjugué π_n associé à θ_n est alors $\dot{\theta}_n$ et l'hamiltonien correspondant s'écrit

$$H = \frac{1}{2}\sum_n \left(\pi_n^2 + \omega_n^2\theta_n^2\right) \tag{1.4}$$

La quantification de ce système se fait de manière canonique, en remplaçant les quantités classiques π_n et θ_n par des opérateurs Π_n et Θ_n obéissant à la relation de commutation

$$[\Theta_m, \Pi_n] = i\hbar\delta_{mn} \tag{1.5}$$

Les états propres de l'hamiltonien sont construits à l'aide des opérateurs d'échelle

$$a_k = \sqrt{\frac{\omega_k}{2\hbar}}(\Theta_k + i\Pi_k/\omega_k) \qquad a_k^\dagger = \sqrt{\frac{\omega_k}{2\hbar}}(\Theta_k - i\Pi_k/\omega_k) \tag{1.6}$$

qui obéissent aux relations de commutations suivantes :

$$\begin{aligned} [a_k, a_q] &= 0 \\ [a_k, a_q^\dagger] &= \delta_{kq} \end{aligned} \tag{1.7}$$

L'hamiltonien s'écrit alors comme suit :

$$H = \sum_k \hbar\omega_k(a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2}) \tag{1.8}$$

La dépendance temporelle des opérateurs d'échelle nous est connue :

$$a_k(t) = a_k(0)\mathrm{e}^{-i\omega_k t} \qquad a_k^\dagger(t) = a_k^\dagger(0)\mathrm{e}^{i\omega_k t} \tag{1.9}$$

Il s'ensuit que la dépendance temporelle de la coordonnée Q_j est

$$\boxed{Q_j(t) = \sum_k R_{jk}\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}}\left(a_k(0)\mathrm{e}^{-i\omega_k t} + a_k^\dagger(0)\mathrm{e}^{i\omega_k t}\right)} \tag{1.10}$$

Comme l'impulsion conjuguée à la variable classique q_j n'est autre que $p_j = \dot{q}_j$, l'opérateur P_j s'exprime ainsi :

$$\boxed{P_j(t) = i\sum_k R_{jk}\sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2}}\left(-a_k(0)\mathrm{e}^{-i\omega_k t} + a_k^\dagger(0)\mathrm{e}^{i\omega_k t}\right)} \tag{1.11}$$

Si S_k désigne l'espace des états de l'oscillateur harmonique indépendant associé à a_k, l'espace des états de notre système est simplement le produit tensoriel suivant :

$$S = S_1 \otimes S_2 \otimes \cdots \otimes S_N \tag{1.12}$$

Un état propre de la chaîne est spécifié par le multiplet $(n_1, \ldots, n_N)$:

$$|n_1, \ldots, n_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! \ldots n_N!}}(a_1^\dagger)^{n_1} \cdots (a_N^\dagger)^{n_N}|0\rangle \tag{1.13}$$

(pour simplifier la notation, on écrit l'état fondamental comme $|0\rangle$ au lieu de $|0, 0, \ldots, 0\rangle$). L'énergie associée à cet état est

$$E = \sum_k (n_k + \frac{1}{2})\hbar\omega_k \tag{1.14}$$

On note que l'énergie du niveau fondamental est

$$E_0 = \sum_k \frac{1}{2}\hbar\omega_k \tag{1.15}$$

1.2 Dégénérescence des fréquences

Il arrive fréquemment que le spectre des fréquences d'un système soit dégénéré, c'est-à-dire que certaines valeurs propres ω_k^2 de D soient multiples. Dans ce cas les opérateurs a_k ne sont pas fixés de manière unique.

S'il y a dégénérescence, il est possible de trouver une matrice unitaire W non triviale telle que $D = WDW^\dagger$. En effet, soit $W^{(\lambda)}$ une matrice unitaire quelconque agissant dans le sous-espace propre associé à λ, de dimension d_λ. Comme la restriction de D à ce sous-espace est un multiple de l'identité, l'action de D commute avec celle de $W^{(\lambda)}$. En choisissant une telle matrice pour chaque valeur propre, on peut construire la matrice

$$W = \bigoplus_\lambda W^{(\lambda)} \tag{1.16}$$

qui est bien telle que $D = WDW^\dagger$. Bien sûr, si $d_\lambda = 1$, la matrice $W^{(\lambda)}$ n'est qu'une phase.

Ceci signifie que la matrice R n'est pas unique, car la matrice $U = RW$ diagonaliserait V tout aussi bien. On peut alors définir de nouveaux opérateurs d'échelle :

$$\tilde{a}_k = \sum_q W^*_{qk} a_q \qquad\qquad \tilde{a}_k^\dagger = \sum_q W_{qk} a_q^\dagger \tag{1.17}$$

Ces opérateurs satisfont toujours aux relations de commutation habituelles des oscillateurs :

$$\begin{aligned}
[\tilde{a}_k, \tilde{a}_q^\dagger] &= \sum_{r,s} W^*_{rk} W_{sq} [a_r, a_s^\dagger] \\
&= \sum_{r,s} W^*_{rk} W_{sq} \delta_{rs} \\
&= \sum_r W^*_{rk} W_{rq} \\
&= (W^\dagger W)_{kq} \\
&= \delta_{kq}
\end{aligned} \tag{1.18}$$

alors que $[\tilde{a}_k, \tilde{a}_q] = 0$. La substitution de ces nouveaux oscillateurs dans le développement (1.10) donne

$$Q_j(t) = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}} \left(U_{jk} \tilde{a}_k(0) \mathrm{e}^{-i\omega_k t} + U^*_{jk} \tilde{a}_k^\dagger(0) \mathrm{e}^{i\omega_k t} \right) \tag{1.19}$$

Signalons ici que la matrice R est réelle, puisque orthogonale. La différence entre U^* et U provient seulement de W.

En bref, il est souvent possible de diagonaliser V par une matrice U qui n'est pas orthogonale, mais plutôt unitaire. Ceci est une signe de dégénérescence des valeurs propres. Les développements (1.10) et (1.11) prennent alors la forme plus générale qui suit :

$$\boxed{\begin{aligned}
Q_j &= \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}} \left(U_{jk} a_k + U^*_{jk} a_k^\dagger \right) \\
P_j &= i \sum_k \sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2}} \left(-U_{jk} a_k + U^*_{jk} a_k^\dagger \right)
\end{aligned}} \tag{1.20}$$

en fonction d'opérateurs d'échelle différents (nous laisserons tomber les tildes (˜) dorénavant). Ces opérateurs d'échelle peuvent s'obtenir explicitement en inversant les relations (1.20):

$$\boxed{\begin{aligned} a_k &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_k}} \sum_j U^*_{jk} \left(\omega_k Q_j + iP_j\right) \\ a^\dagger_k &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_k}} \sum_j U_{jk} \left(\omega_k Q_j - iP_j\right) \end{aligned}} \tag{1.21}$$

1.3 Chaîne linéaire d'oscillateurs

Comme exemple de système du type (1.1) considérons un anneau de N oscillateurs couplés aux plus proches voisins. Physiquement, on suppose qu'on a affaire à une chaîne d'ions en interaction. La coordonnée u_n représente la déviation du n^e ion de sa position d'équilibre. On adopte la géométrie annulaire pour simplifier les conditions aux limites : $u_{n+N} = u_n$. En supposant que chaque ion est relié à son voisin par une potentiel quadratique de même force pour tous les ions, on écrit le lagrangien suivant :

$$L = \frac{1}{2} \sum_n \left\{ m\dot{u}_n^2 - m\Omega^2 (u_n - u_{n+1})^2 \right\} \tag{1.22}$$

En définissant les variables $q_n = \sqrt{m} u_n$ on écrit plutôt

$$L = \frac{1}{2} \sum_n \left\{ \dot{q}_n^2 - \Omega^2 (q_n - q_{n+1})^2 \right\} \tag{1.23}$$

Ce lagrangien a la forme (1.1), où la matrice V est donnée par

$$V_{rs} = \Omega^2 (2\delta_{r,s} - \delta_{r,s-1} - \delta_{r,s+1}) \tag{1.24}$$

où il est implicite que l'indice $N+1$ est identifié à 1.

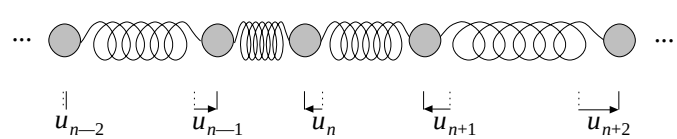


Figure 1.1. Chaîne linéaire d'oscillateurs. Chaque cercle représente un atome déplacé de sa position d'équilibre par une coordonnée u_n.

Résoudre le problème revient à diagonaliser la matrice V. Le fait que cette matrice soit invariante par rapport aux translations d'indices $(r, s) \to (r+1, s+1)$ nous indique qu'une transformée de Fourier discrète peut effectuer cette diagonalisation : autrement dit, la matrice de transformation U doit être

$$U_{kr} = \frac{1}{\sqrt{N}} \mathrm{e}^{ikr} \qquad\qquad k \in \frac{2\pi\mathbb{Z}}{N} \tag{1.25}$$

Les indices r ou k prennent N valeurs consécutives ($r \in \mathbb{Z}$ et $k \in 2\pi\mathbb{Z}/N$). Par exemple, r va de 1 à N et k de 0 à 2π exclusivement. On vérifie aisément que la matrice U est unitaire, car

$$\frac{1}{N} \sum_k \mathrm{e}^{ik(r-s)} = \delta_{rs} \tag{1.26}$$

Effectuons maintenant la diagonalisation :

$$\begin{aligned}(U^\dagger V U)_{kq} &= \Omega^2 \frac{1}{N} \sum_{rs} \mathrm{e}^{-i(kr-qs)}(2\delta_{rs} - \delta_{r,s-1} - \delta_{r,s+1}) \\ &= \Omega^2 \frac{1}{N} \sum_{r} \mathrm{e}^{-ir(k-q)}(2 - \mathrm{e}^{iq} - \mathrm{e}^{-iq}) \\ &= 2\Omega^2(1-\cos k)\delta_{kq}\end{aligned} \tag{1.27}$$

Les valeurs propres ω_k^2 sont donc

$$\boxed{\omega_k^2 = 2\Omega^2(1-\cos k)} \tag{1.28}$$

On constate la dégénérescence d'ordre 2 pour chaque valeur propre : k est jumelé à $-k$. Comme indiqué plus haut, cette dégénérescence est intimement liée au fait qu'on puisse diagonaliser V à l'aide d'une matrice unitaire et non simplement orthogonale.

Le développement (1.20) appliqué à l'opérateur Q_r donne

$$Q_r = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2N\omega_k}} \left(\mathrm{e}^{ikr} a_k + \mathrm{e}^{-ikr} a_k^\dagger\right) \tag{1.29}$$

alors que les opérateurs d'échelle sont ici

$$\begin{aligned} a_k &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_k N}} \sum_r \mathrm{e}^{-irk}\left(\omega_k Q_r + iP_r\right) \\ a_k^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_k N}} \sum_r \mathrm{e}^{irk}\left(\omega_k Q_r - iP_r\right)\end{aligned} \tag{1.30}$$

Le développement (1.29) n'est pas strictement valide ici : le terme $k = 0$ est mal défini, car la fréquence ω_0 s'annule. Un tel mode d'oscillation porte le nom de *mode nul* ou de *mode de Goldstone*. Ce mode correspond aux déplacements en bloc de la chaîne, pour lesquels il n'existe pas de force de rappel. Il faut donc séparer Q_r en une coordonnée moyenne Q_0, plus une partie qui oscille autour de la position moyenne et qui est donnée par la série (1.29) sans le terme $k = 0$.

1.4 Translations et impulsion cristalline

L'hamiltonien quantique correspondant au lagrangien (1.23) est

$$H = \sum_n \left\{\frac{1}{2}P_n^2 + \frac{1}{2}\Omega^2(Q_n - Q_{n+1})^2\right\} \qquad [Q_m, P_n] = i\hbar\delta_{mn} \tag{1.31}$$

Cet hamiltonien est invariant par rapport aux translations uniformes des coordonnées : $Q_n \to Q_n + b$. Cette opération est effectuée par un opérateur $T(b)$ généré par l'impulsion totale $P_{\text{tot.}}$ de la chaîne :

$$T(b) = \exp -\frac{i}{\hbar} b P_{\text{tot.}} \quad \text{où} \quad P_{\text{tot.}} = \sum_n P_n \tag{1.32}$$

Le fait que H ne dépende que des différences des coordonnées signifie que $[H, P_{\text{tot.}}] = 0$ et donc que $P_{\text{tot.}}$ est une quantité conservée : c'est l'impulsion de la chaîne en entier, qui est conjuguée à la coordonnée moyenne Q_0 définie plus haut.

Cependant, quand $b = a_0$, le pas de réseau, la translation $T(a_0)$ devient équivalente à une autre opération de symétrie, par laquelle l'ion n est remplacé par l'ion $n-1$. Cette opération est effectuée par un opérateur unitaire qu'on appellera simplement T:

$$T^\dagger Q_n T = Q_{n-1} \qquad\qquad T^\dagger P_n T = P_{n-1} \tag{1.33}$$

Notons que l'opération T change l'impulsion P_n, ce que ne fait pas une translation ordinaire. Donc T n'est pas à proprement parler une translation du système, mais plutôt une permutation cyclique de ses composantes. Cependant, en raison de sa ressemblance avec une translation, on lui laisse ce nom. On définit alors une *impulsion cristalline* $P_{\text{cr.}}$ telle que

$$T = \mathrm{e}^{-ia_0 P_{\text{cr.}}/\hbar} \tag{1.34}$$

Il ne faut cependant pas confondre la quantité physique $P_{\text{cr.}}$ avec l'impulsion totale $P_{\text{tot.}}$ du cristal. Cependant, nous l'appellerons tout de même 'impulsion'.

L'action de T est discrète et donc ses valeurs propres ne forment pas un spectre continu. On vérifie facilement que

$$\begin{aligned} T^\dagger a_k T &= \frac{1}{\sqrt{2N\hbar\omega_k}} \sum_r \mathrm{e}^{-irk} \left(\omega_k T^\dagger Q_r T + iT^\dagger P_r T\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2N\hbar\omega_k}} \sum_r \mathrm{e}^{-irk} \left(\omega_k Q_{r-1} + iP_{r-1}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2N\hbar\omega_k}} \mathrm{e}^{-ik} \sum_r \mathrm{e}^{-irk} \left(\omega_k Q_r + iP_r\right) \\ &= \mathrm{e}^{-ik} a_k \end{aligned} \tag{1.35}$$

De même, on trouve que

$$T^\dagger a_k^\dagger T = \mathrm{e}^{ik} a_k^\dagger \tag{1.36}$$

L'action de $T^\dagger$ sur l'état $a_k^\dagger|0\rangle$ est alors

$$T^\dagger a_k^\dagger|0\rangle = T^\dagger a_k^\dagger T T^\dagger|0\rangle = \mathrm{e}^{ik} a_k^\dagger|0\rangle \tag{1.37}$$

Nous avons utilisé le fait que $T^\dagger|0\rangle = |0\rangle$ (l'état fondamental est invariant par rapport aux permutations cycliques des atomes : c'est un état d'impulsion cristalline nulle). L'état $a_k^\dagger|0\rangle$ est donc un état propre de l'opérateur de translation T par une distance a_0, avec valeur propre e^{-ik}. On voit que l'impulsion cristalline correspondant à cette valeur propre, selon la définition (1.34), est

$$p = \frac{\hbar k}{a_0} \qquad\qquad a_0 : \text{pas de réseau} \tag{1.38}$$

Comme le domaine de variation de k est (disons) de $-\pi$ à π, celui de p va de $-\Lambda$ à Λ, où $\Lambda = \pi\hbar/a_0$. La relation de dispersion devient

$$\omega_k^2 \to \omega^2(p) = 2\Omega^2 \left(1 - \cos\frac{\pi p}{\Lambda}\right) \tag{1.39}$$

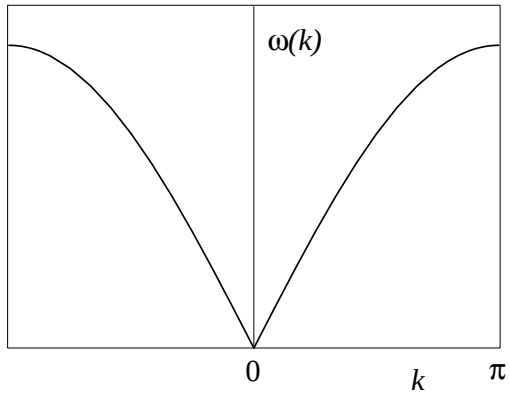


Figure 1.2. Relation de dispersion des phonons de la chaîne linéaire, en fonction de p/Λ.

Ceci justifie l'interprétation de l'état $a_k^\dagger|0\rangle$ comme représentant une particule : il a une énergie et une impulsion bien déterminées. L'état $a_q^\dagger a_k^\dagger|0\rangle$ représente alors deux particules d'impulsions $\hbar k/c$ et $\hbar q/c$ respectivement, qui se croisent sans interagir : l'énergie de l'état à deux particules est la somme des deux états à une particules, ce qui signifie que ces particules sont libres. On définit de même des états à n particules. L'état fondamental $|0\rangle$ ne contenant aucune particule, on l'appelle le *vide*. Les opérateurs $a_k^\dagger$ reçoivent alors le nom d'*opérateurs de création* et a_k celui d'*opérateurs d'annihilation* ou de *destruction*.

Ces particules sont des *bosons* puisque l'état à deux particules est indépendant de l'ordre avec lequel les deux particules sont créées :

$$a_q^\dagger a_k^\dagger|0\rangle = a_k^\dagger a_q^\dagger|0\rangle \tag{1.40}$$

Ceci découle bien sûr de la première des relations (1.7). Physiquement, ces particules représentent les quanta d'oscillation de la chaîne d'ions et sont connues sous le nom de *phonons*.

2 Champ scalaire

2.1 Limite continue

Retournons au lagrangien (1.23) associé à la chaîne d'oscillateurs et effectuons la limite continue. Pour cela on suppose que le pas de réseau a_0 tend vers zéro alors que la longueur $L = Na_0$ de la chaîne reste fixe. Il faut alors remplacer les sommes sur n par des intégrales sur $x = na_0$ et les deltas de Kronecker par des fonctions delta :

$$\sum_{n=1}^{N} \to a_0^{-1} \int_{-L/2}^{L/2} \mathrm{d}x \quad \text{et} \quad \delta_{mn} \to a_0 \delta(x - x') \tag{2.1}$$

La première de ces relations est évidente et la seconde assure le passage

$$\sum_n \delta_{mn} = 1 \to \int_{-L/2}^{L/2} \mathrm{d}x \; \delta(x - x') = 1 \tag{2.2}$$

On définit ensuite un champ $\phi(x)$:

$$\phi(x) = \sqrt{\frac{m}{a_0}} u_n = \frac{1}{\sqrt{a_0}} q_n \qquad (x = na_0) \tag{2.3}$$

Dans la limite continue, le lagrangien (1.23) devient donc

$$L = \frac{1}{2} \int \mathrm{d}x \ \left(\dot{\phi}^2 - v^2 (\partial_x \phi)^2 \right) \qquad (v \equiv \Omega a_0) \tag{2.4}$$

Le lagrangien est alors une *fonctionnelle* du champ ϕ, c'est-à-dire qu'il dépend non plus d'un nombre fini de variables, mais d'une fonction $\phi(x)$ et de sa dérivée par rapport au temps $\dot{\phi}(x)$. On utilise souvent des crochets pour signifier une dépendance fonctionnelle, comme ceci : $L[\phi, \dot{\phi}]$. Dans la plupart des situations physiques, le lagrangien est une fonctionnelle *locale*, c'est-à-dire qu'il s'exprime comme l'intégrale d'une *densité lagrangienne* $\mathcal{L}$, qui dépend de ϕ, de $\dot{\phi}$ et d'un certain nombre de leurs dérivées :

$$L[\phi, \dot{\phi}] = \int \mathrm{d}x \ \mathcal{L}(\phi, \dot{\phi}, \partial_x \phi, \partial_x \dot{\phi}, \ldots)$$

Dans le cas qui nous occupe, la densité lagrangienne est simplement

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \dot{\phi}^2 - \frac{1}{2} v^2 (\partial_x \phi)^2 \tag{2.5}$$

Notons que même si le lagrangien L dépend d'une infinité de variables (c'est une fonctionnelle), la densité lagrangienne ne dépend que d'un nombre fini de variables (deux seulement dans le cas qui nous occupe : $\dot{\phi}$ et $\partial_x \phi$). Par contre, ces variables dépendent de x et du temps.

Dérivée fonctionnelle

Lors d'une variation infinitésimale $\delta\phi$ de la fonction ϕ, la fonctionnelle $L[\phi, \dot{\phi}]$ est modifiée. Au premier ordre en $\delta\phi$, on écrit cette variation sous la forme suivante :

$$\delta L = \int \mathrm{d}x \ \left\{ \frac{\delta L}{\delta \phi(x)} \delta\phi(x) + \frac{\delta L}{\delta \dot{\phi}(x)} \delta\dot{\phi}(x) \right\} \tag{2.6}$$

Cette expression constitue en fait une définition des dérivées fonctionnelles

$$\frac{\delta L}{\delta \phi(x)} \quad \text{et} \quad \frac{\delta L}{\delta \dot{\phi}(x)}$$

En pratique, le calcul des dérivées fonctionnelles procède souvent par intégration par parties. Par exemple, en supposant que la densité lagrangienne ne dépende que de ϕ, $\dot{\phi}$ et $\partial_x \phi$, on effectue le calcul suivant :

$$\begin{aligned} \delta L &= \int \mathrm{d}x \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} \delta\phi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \delta\dot{\phi} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_x \phi} \delta(\partial_x \phi) \right\} \\ &= \int \mathrm{d}x \left\{ \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \partial_x \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_x \phi} \right) \delta\phi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \delta\dot{\phi} \right\} \end{aligned}$$

où on a intégré le dernier terme par parties, en supposant que les termes de bord sont nuls (parce que la variation s'annule aux extrémités, ou parce que le système est défini sur un espace fermé, tel un cercle). Donc

$$\frac{\delta L}{\delta \phi(x)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \partial_x \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_x \phi} \quad \text{et} \quad \frac{\delta L}{\delta \dot{\phi}(x)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \tag{2.7}$$

Avant de prendre la limite continue, la variation de L peut s'écrire

$$\begin{aligned}\delta L &= a_0 \sum_n \left\{ \frac{\delta L}{\delta\phi(a_0 n)} \delta\phi(a_0 n) + \frac{\delta L}{\delta\dot{\phi}(a_0 n)} \delta\dot{\phi}(a_0 n) \right\} \\ &= \sqrt{a_0} \sum_n \left\{ \frac{\delta L}{\delta\phi(a_0 n)} \mathrm{d}q_n + \frac{\delta L}{\delta\dot{\phi}(a_0 n)} \mathrm{d}\dot{q}_n \right\}\end{aligned}$$

On établit donc la correspondance suivante entre les dérivées fonctionnelles et les dérivées de L par rapport aux variables discrètes :

$$\frac{\partial L}{\partial q_n} \Longleftrightarrow \sqrt{a_0} \frac{\delta L}{\delta\phi} \qquad\qquad p_n = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_n} \Longleftrightarrow \sqrt{a_0} \frac{\delta L}{\delta\dot{\phi}} \tag{2.8}$$

(p_n est le moment conjugué à q_n). La relation de commutation canonique $[q_n, p_m] = i\hbar\delta_{mn}$ devient alors

$$\left[\sqrt{a_0}\phi(x), \sqrt{a_0} \frac{\delta L}{\delta\dot{\phi}(x')} \right] = i a_0 \delta(x - x')$$

ou encore

$$\boxed{[\phi(x), \Pi(x')] = i\hbar\delta(x - x')} \tag{2.9}$$

si on définit le champ conjugué

$$\boxed{\Pi(x) \equiv \frac{\delta L}{\delta\dot{\phi}(x)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}}(x)} \quad . \tag{2.10}$$

L'hamiltonien est alors

$$\begin{aligned}H &= \sum_n p_n \dot{q}_n - L \\ &= \sum_n \Big(a_0 \Pi(a_0 n) \dot{\phi}(a_0 n) - a_0 \mathcal{L} \Big) \\ &\to \int \mathrm{d}x \ \Big(\Pi(x)\dot{\phi}(x) - \mathcal{L} \Big)\end{aligned}$$

Il est alors naturel de définir une *densité hamiltonienne* $\mathcal{H}$:

$$\boxed{\mathcal{H} = \Pi\dot{\phi} - \mathcal{L}} \tag{2.11}$$

Dans le cas particulier du système qui nous occupe, le moment conjugué au champ $\phi(x)$ est $\Pi(x) = \dot{\phi}$ et l'hamiltonien correspondant est alors

$$H = \frac{1}{2} \int \mathrm{d}x \ \big(\Pi(x)^2 + v^2 (\partial_x \phi)^2 \big) \tag{2.12}$$

alors que les relations de commutation sont comme en (2.9).

Note
Une autre façon de calculer des dérivées fonctionnelles est de garder à l'esprit qu'une intégrale équivaut à une sommation et que la variable x équivaut à un indice de sommation. On peut alors utiliser la règle d'enchaînement, ainsi que certaines règles simples de différentiation. Par exemple, l'identité

$$\phi(x) = \int \mathrm{d}y\ \phi(y)\delta(y-x)$$

mène directement à la règle suivante :

$$\frac{\delta\phi(x)}{\delta\phi(y)} = \delta(y-x)$$

De même, l'identité

$$\partial_x\phi(x) = \int \mathrm{d}y\ \partial_y\phi(y)\delta(y-x) = -\int \mathrm{d}y\ \phi(y)\partial_y\delta(y-x)$$

mène à la règle

$$\frac{\delta\partial_x\phi(x)}{\delta\phi(y)} = -\partial_y\delta(y-x) = \partial_x\delta(y-x)$$

Par exemple, si une fonctionnelle F est donnée par

$$F[\phi] = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}x\ \left[\phi^2(x) + (\partial_x\phi(x))^2\right]\ ,$$

alors les règles ci-haut nous permettent de calculer que

$$\begin{aligned}
\frac{\delta F}{\delta\phi(x)} &= \int \mathrm{d}y\ \left[\phi(y)\frac{\delta\phi(y)}{\delta\phi(x)} + (\partial_y\phi(y))\frac{\delta\partial_y\phi(y)}{\delta\phi(x)}\right] \\
&= \int \mathrm{d}y\ \left[\phi(y)\delta(x-y) + \partial_y\phi(y)\partial_y\delta(x-y)\right] \\
&= \int \mathrm{d}y\ \left[\phi(y) - \partial_y^2\phi(y)\right]\delta(x-y) \\
&= \phi(x) - \partial_x^2\phi(x)
\end{aligned}$$

2.2 Relation de dispersion et énergie du vide

Trouvons les états propres et les valeurs propres de l'hamiltonien (2.12). Nous pourrions simplement prendre la limite continue des résultats obtenus pour la chaîne discrète d'oscillateurs. Nous allons cependant répéter le processus suivi alors, mais dans le 'langage' continu.

Commençons par définir les transformées de Fourier

$$\tilde{\phi}(p) = \int \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{-ipx}\phi(x) \qquad \phi(x) = \int (\mathrm{d}p)\ \mathrm{e}^{ipx}\tilde{\phi}(p) \tag{2.13}$$

et pareillement pour $\tilde{\Pi}(p)$. On remarque que $\phi^\dagger(p) = \phi(-p)$. Ici nous avons supposé que la longueur L tend vers l'infini, de sorte que le nombre d'onde p admet un continuum de valeurs : nous utilisons la transformée de Fourier plutôt que la série de Fourier. L'hamiltonien peut maintenant s'écrire

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2}\int \mathrm{d}x(\mathrm{d}p)(\mathrm{d}q)\ \left\{\tilde{\Pi}(p)\tilde{\Pi}(q) - v^2pq\tilde{\phi}(p)\tilde{\phi}(q)\right\}\mathrm{e}^{ix(p+q)} \\
&= \frac{1}{2}\int (\mathrm{d}p)\ \left\{\tilde{\Pi}^\dagger(p)\tilde{\Pi}(p) + v^2p^2\tilde{\phi}^\dagger(p)\tilde{\phi}(p)\right\}
\end{aligned} \tag{2.14}$$

où nous avons utilisé la relation

$$\int \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{ix(p+q)} = 2\pi\delta(p+q) \tag{2.15}$$

Sous cette forme l'hamiltonien représente une collection continue d'oscillateurs harmoniques découplés, de masses unité et de fréquences $|p|v$.

Les opérateurs $\tilde{\phi}(p)$ et $\tilde{\Pi}(p')$ satisfont à la relation de commutation

$$\begin{aligned}[\tilde{\phi}(p), \tilde{\Pi}(p')] &= \int \mathrm{d}x\mathrm{d}x'\ \mathrm{e}^{-i(px+p'x')}[\phi(x), \Pi(x')] \\ &= i\hbar \int \mathrm{d}x\mathrm{d}x'\ \mathrm{e}^{-i(px+p'x')}\delta(x-x') \\ &= i\hbar 2\pi\delta(p+p')\end{aligned} \tag{2.16}$$

ou encore

$$[\tilde{\phi}(p), \tilde{\Pi}^\dagger(p')] = i\hbar 2\pi\delta(p-p') \tag{2.17}$$

Comme auparavant, on définit des opérateurs d'échelle :

$$\begin{aligned}a(p) &= \sqrt{\frac{v|p|}{2\hbar}}\left(\tilde{\phi}(p) + \frac{i}{v|p|}\tilde{\Pi}(p)\right) \\ a^\dagger(p) &= \sqrt{\frac{v|p|}{2\hbar}}\left(\tilde{\phi}^\dagger(p) - \frac{i}{v|p|}\tilde{\Pi}^\dagger(p)\right)\end{aligned} \tag{2.18}$$

en fonction desquels l'hamiltonien s'écrit maintenant

$$H = \frac{1}{2}\hbar \int (\mathrm{d}p)\ |p|v\left\{a^\dagger(p)a(p) + a(p)a^\dagger(p)\right\} \tag{2.19}$$

Les opérateurs d'échelle satisfont à la relation de commutation suivante :

$$[a(p), a^\dagger(q)] = 2\pi\delta(p-q) \tag{2.20}$$

En utilisant cette relation, l'hamiltonien peut s'écrire comme suit :

$$H = \int (\mathrm{d}p)\ \hbar|p|v\ a^\dagger(p)a(p) + E_0 \tag{2.21}$$

où la constante E_0, égale en fait à l'énergie du niveau fondamental, est donnée par

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar \int (\mathrm{d}p)\ |p|v 2\pi\delta(0) \tag{2.22}$$

Cette énergie est formellement infinie. Cependant, il faut se rappeler que dans le processus de limite continue, p est intégré de $-\pi/a_0$ à π/a_0 et $\delta(p=0)$ correspond à $L/2\pi$ ($L = Na_0$). L'énergie du vide est alors

$$E_0 \approx \frac{L\hbar}{2\pi}\int_0^\Lambda \mathrm{d}p\ pv = \frac{L\hbar v\Lambda^2}{4\pi} \tag{2.23}$$

Cette expression est bien évidemment une approximation à la véritable énergie du fondamental, qui devrait être calculée en sommant sur des impulsions discrètes la relation de dispersion (1.39).

Les opérateurs $a^\dagger(p)$ et $a(p)$ ont encore la même fonction : celle de créer et d'annihiler respectivement des particules d'impulsion $\hbar p$. Cela se voit en notant les commutations suivantes :

$$[H, a(p)] = -v\hbar|p|a(p) \qquad [H, a^\dagger(p)] = v\hbar|p|a^\dagger(p) \tag{2.24}$$

La particule créée par $a^\dagger(p)$ possède alors une énergie

$$E(p) = \hbar v|p| \tag{2.25}$$

Cette relation de dispersion correspond à des particules sans masse (comparer avec celle des photons : la vitesse v devient alors la vitesse de la lumière). Ces particules se propagent à une vitesse v, qui est à la fois la vitesse de phase et la vitesse de groupe des paquets d'ondes correspondants.

L'état fondamental $|0\rangle$ (le vide) est bien sûr spécifié par la condition $a(p)|0\rangle = 0$ pour toute valeur de p. D'après (2.23) on voit que le vide est caractérisé par une *densité d'énergie* qui tend vers l'infini quand $\Lambda \to \infty$. Il s'agit d'une divergence *ultraviolette* sans conséquence, puisque le point zéro de l'énergie peut être redéfini sans problème : c'est la différence entre l'énergie du vide et l'énergie des états excités qui compte.[1]

Les états comprenant une seule particule sont de la forme $a^\dagger(p)|0\rangle$. En raison du spectre continu de p, ces états ne sont pas normalisables dans la limite de volume infini :

$$\langle 0|a(p)a^\dagger(q)|0\rangle = \langle 0|[a(p), a^\dagger(q)]|0\rangle = 2\pi\delta(p-q) \tag{2.26}$$

Les états à deux particules sont de la forme $a^\dagger(q)a^\dagger(p)|0\rangle$, etc.

Remarquons que la relation de dispersion $E(p) = v|p|$ s'obtient aussi en appliquant la limite $a_0 \to 0$ à la relation de dispersion de la chaîne discrète :

$$\hbar\omega_k \to \hbar\Omega a_0|p| = \hbar v|p| \tag{2.27}$$

Cette relation est également valide quand $a_0 \ll 1/p$, c'est-à-dire quand la distance associée à p est grande par rapport à a_0.

2.3 Terme de masse

Le lagrangien du champ scalaire (2.5) est naturellement associé aux phonons accoustiques en une dimension. On peut cependant le modifier facilement afin que les particules correspondantes aient une masse. Il suffit pour cela d'y ajouter le terme suivant :

$$\mathcal{L} \to \mathcal{L} - \frac{1}{2}(mv^2/\hbar)^2\phi^2 \tag{2.28}$$

ce qui revient à modifier l'hamiltonien ainsi :

$$H \to H + \frac{1}{2}\int \mathrm{d}x\ (mv^2/\hbar)^2\phi^2 = H + \frac{1}{2}\int (\mathrm{d}p)\ (mv^2/\hbar)^2\tilde{\phi}^\dagger(p)\tilde{\phi}(p) \tag{2.29}$$

Sans refaire les calculs de la sous-section précédente, il suffit de faire la substitution

$$\hbar|p| \to \sqrt{\hbar^2p^2 + m^2v^2} \tag{2.30}$$

[1] Un problème se pose en relativité générale, où la courbure de l'espace-temps se couple à la densité d'énergie en chaque point, qui peut inclure l'énergie du vide. C'est le célèbre problème de la *constante cosmologique*.

dans la définition des opérateurs d'échelle. La relation de dispersion est alors

$$E(p) = \sqrt{(\hbar p v)^2 + m^2 v^4} \tag{2.31}$$

Quand v est égal à la vitesse de la lumière, il s'agit de la relation de dispersion d'une particule relativiste de masse m. Dans la limite où $\hbar p$ est petit par rapport à mv, on peut écrire

$$E(p) \approx mv^2 + \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \cdots \tag{2.32}$$

On constate que m est la masse effective des particules, alors que mv^2 est la largeur de la bande interdite (gap) entre E_0 et l'énergie du premier état excité $a^\dagger(p=0)|0\rangle$.

2.4 Cas tridimensionnel

Dans le but de simplifier les choses, nous n'avons travaillé jusqu'ici qu'en dimension 1. Le lagrangien du champ scalaire en dimension 3 s'écrit simplement

$$L = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3 r \ \left(\dot{\phi}^2 - v^2 \nabla\phi\cdot\nabla\phi - (mv^2/\hbar)^2\phi^2\right) \tag{2.33}$$

Les transformées de Fourier sont alors

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}(\mathbf{p}) &= \int \mathrm{d}^3 r \ \mathrm{e}^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}\phi(\mathbf{r}) \\ \phi(\mathbf{r}) &= \int (\mathrm{d}^3 p) \ \mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}\tilde{\phi}(\mathbf{p}) \end{aligned} \qquad (\mathrm{d}^3 p) \equiv \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi)^3} \tag{2.34}$$

Les opérateurs d'échelle obéissent à la relation suivante :

$$[a(\mathbf{p}), a^\dagger(\mathbf{q})] = (2\pi)^3\delta(\mathbf{p}-\mathbf{q}) \tag{2.35}$$

Enfin, la relation de dispersion est

$$E(\mathbf{p}) = \sqrt{\hbar^2\mathbf{p}^2 + m^2 v^4} \tag{2.36}$$

2.5 Fonctions propres générales

Les états propres de l'hamiltonien (2.12) peuvent être identifiés malgré la complexité apparente du système physique associé parce que le lagrangien (2.5) est quadratique en ϕ et en $\dot{\phi}$. Les équations du mouvement sont alors linéaires en ϕ et la dynamique classique de ces systèmes est également simple. Inspirons-nous de la section 1 et écrivons ainsi le lagrangien quadratique le plus général :

$$L = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3 r \ (\dot{\phi}^2 + \phi\mathcal{D}\phi) \tag{2.37}$$

où $\mathcal{D}$ est un opérateur différentiel agissant sur ϕ. Par exemple, Dans le cas étudié précédemment du champ scalaire massif, on a

$$\mathcal{D} = \nabla^2 - \mu^2 \qquad \mu \equiv mv^2/\hbar \tag{2.38}$$

Ceci se vérifie en intégrant $\phi\nabla^2\phi$ par parties, ce qui produit $-\nabla\phi\cdot\nabla\phi$.

L'équation du mouvement classique qui découle du lagrangien (2.37) est la suivante :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}} - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi} = \ddot{\phi} - \mathcal{D}\phi = 0 \tag{2.39}$$

Dans le cas du champ scalaire massif, cette équation est l'*équation de Klein-Gordon*:

$$\ddot{\phi} - \nabla^2\phi + \mu^2\phi = 0 \tag{2.40}$$

Ce n'est pas tant l'équation du mouvement qui nous intéresse que les états propres de l'hamiltonien. Pour cela nous introduisons une base de fonctions $u_n(\mathbf{r})$ qui diagonalisent l'opérateur $\mathcal{D}$, c'est-à-dire des fonctions propres de $\mathcal{D}$:

$$\mathcal{D}u_n(\mathbf{r}) = -\omega_n^2 u_n(\mathbf{r}) \tag{2.41}$$

Ici l'indice n est supposé discret, alors qu'il peut aussi être continu. On a aussi supposé que la valeur propre de $\mathcal{D}$ est réelle négative. Dans le cas contraire, la 'fréquence' ω_n est alors imaginaire. On suppose que l'opérateur $\mathcal{D}$ est hermitique. Il est alors possible de choisir une base de fonctions propres orthonormales réelles :

$$\int \mathrm{d}^3r\ u_n(\mathbf{r})u_m(\mathbf{r}) = \delta_{mn} \tag{2.42}$$

On suppose aussi que cette base est complète :

$$\sum_n u_n(\mathbf{r})u_n(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{2.43}$$

Toute configuration du champ ϕ peut être exprimée en fonction de la base de fonctions propres de $\mathcal{D}$:

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}) &= \sum_n c_n u_n(\mathbf{r}) \\ c_n &= \int \mathrm{d}^3r\ u_n(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{2.44}$$

Cette relation constitue en fait un changement de variables : on peut maintenant étudier la dynamique du système à l'aide des coordonnées généralisées c_n au lieu du champ $\phi(\mathbf{r})$ lui-même. Le lagrangien peut s'exprimer en fonction des coefficients c_n:

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2}\sum_{m,n}\int \mathrm{d}^3r\ \left\{\dot{c}_n\dot{c}_m u_n(\mathbf{r})u_m(\mathbf{r}) + c_n c_m u_n(\mathbf{r})\mathcal{D}u_m(\mathbf{r})\right\} \\ &= \frac{1}{2}\sum_{m,n}\left\{\dot{c}_n\dot{c}_m\delta_{mn} - \omega_m^2 c_n c_m\delta_{mn}\right\} \\ &= \frac{1}{2}\sum_n\left(\dot{c}_n^2 - \omega_n^2 c_n^2\right) \end{aligned} \tag{2.45}$$

On obtient simplement un ensemble d'oscillateurs découplés. L'analyse de la section 1 peut être reprise ici, avec la correspondance suivante :

$$\begin{aligned} r &\to \mathbf{r} \\ \theta_n &\to c_n \\ U_{rn} &\to u_n(\mathbf{r}) \\ \sum_r &\to \int \mathrm{d}^3r \end{aligned} \tag{2.46}$$

À chaque mode u_n on peut associer un opérateur d'annihilation a_n en fonction duquel l'hamiltonien s'écrit

$$H = \sum_n \hbar\omega_n (a_n^\dagger a_n + \frac{1}{2}) \tag{2.47}$$

Le champ quantique ϕ admet alors le développement

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_n \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_n}} \left\{ a_n u_n(\mathbf{r}) + a_n^\dagger u_n(\mathbf{r}) \right\} \tag{2.48}$$

Les états propres de H sont de la forme habituelle. Le problème de la résolution de l'hamiltonien est donc réduit à celui des fonctions propres de l'opérateur différentiel $\mathcal{D}$.

Notons encore une fois ici qu'il peut arriver que le système comporte une symétrie qui cause une dégénérescence des valeurs propres ω_n^2. Cette dégénérescence nous permet en principe de diagonaliser l'hamiltonien à l'aide de fonctions propres complexes ($u_n^* \neq u_n$). Dans ce cas, la discussion de la section 1.2 s'applique et les résultats ci-haut doivent être légèrement modifiés : on écrit les relations d'orthogonalité et de fermeture

$$\begin{aligned} \int \mathrm{d}^3 r \; u_n^*(\mathbf{r}) u_m(\mathbf{r}) &= \delta_{mn} \\ \sum_n u_n^*(\mathbf{r}) u_n(\mathbf{r}') &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned} \tag{2.49}$$

Le développement de $\phi(\mathbf{r})$ devient

$$\boxed{\phi(\mathbf{r}) = \sum_n \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_n}} \left\{ a_n u_n(\mathbf{r}) + a_n^\dagger u_n^*(\mathbf{r}) \right\}} \tag{2.50}$$

Notons finalement que dans le cas du champ scalaire massif, les fonctions propres sont simplement les exponentielles complexes :

$$(\nabla^2 - \mu^2)\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = -\omega^2(\mathbf{k})\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \qquad \omega^2(\mathbf{k}) = \mathbf{k}^2 + \mu^2 \tag{2.51}$$

On a alors le développement

$$\phi(\mathbf{r}) = \int (\mathrm{d}^3 k) \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\mathbf{k})}} \Big\{ a(\mathbf{k})\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + a^\dagger(\mathbf{k})\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \Big\} \tag{2.52}$$

3 Photons

Dans cette section nous effectuerons la quantification du champ électromagnétique . Il s'agit du premier exemple de quantification des champs qui ait été réalisé, mais il ne s'agit pas du cas le plus simple, en raison notamment de la nature vectorielle de ce champ, mais surtout, à un niveau plus profond, en raison de la liberté de jauge.

3.1 Rappels d'électromagnétisme

Même si les champs électrique $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ sont les quantités sur lesquelles l'accent est mis en électromagnétisme classique, la mécanique quantique accorde plus d'importance aux quantités qui figurent en tant que variables dynamiques dans le lagrangien et l'hamiltonien, à savoir les potentiels électromagnétiques Φ et $\mathbf{A}$, reliés aux champs par

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \qquad\qquad \mathbf{B} = \nabla \wedge \mathbf{A}$$

Les champs $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ ne déterminent pas de manière unique les potentiels. Il est possible d'effectuer des *transformations de jauge* sur les potentiels sans que les champs soient affectés :

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} - \nabla\xi \qquad\qquad \Phi' = \Phi + \frac{1}{c}\frac{\partial \xi}{\partial t} \tag{3.1}$$

Ici ξ est une fonction arbitraire de $\mathbf{r}$ et t.

Le champ électromagnétique est gouverné par les équations de Maxwell :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{E} &= 4\pi\rho & \nabla \wedge \mathbf{B} - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} &= \frac{4\pi}{c}\mathbf{J} \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 & \nabla \wedge \mathbf{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &= 0 \end{aligned} \tag{3.2}$$

Ici ρ est la densité de charge électrique et $\mathbf{J}$ la densité de courant électrique. Les deux équations de la ligne du bas découlent de (3.0), alors que les deux de la ligne du haut découlent du lagrangien suivant :

$$L = \frac{1}{8\pi}\int \mathrm{d}^3r\ (\mathbf{E}^2 - \mathbf{B}^2) + \int \mathrm{d}^3r\ \left(\frac{1}{c}\mathbf{J}\cdot\mathbf{A} - \rho\Phi\right) \tag{3.3}$$

Dans ce qui suit nous supposerons que $\rho = 0$ et $\mathbf{J} = 0$: nous nous intéresserons à la quantification des ondes électromagnétiques se propageant dans le vide. Nous travaillerons dans la *jauge de Coulomb*, c'est-à-dire que nous utiliserons l'arbitraire dans les potentiels pour imposer la condition

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \tag{3.4}$$

Cette condition, conjuguée à la loi de Gauss, mène à l'expression suivante pour le potentiel électrique :

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \int \mathrm{d}^3r'\ \frac{\rho(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \tag{3.5}$$

Cette relation signfie que Φ est entièrement déterminé par ρ et n'a pas de dynamique propre. Dans le vide on peut donc poser $\Phi = 0$.

3.2 Fonctions propres

Dans la jauge de Coulomb, le lagrangien du champ dans le vide prend la forme suivante :

$$L = \frac{1}{8\pi}\sum_i \int \mathrm{d}^3 r \ \left(\frac{1}{c^2}\dot{A}_i\dot{A}_i - \nabla A_i \cdot \nabla A_i\right) \qquad (\nabla \cdot \mathbf{A} = 0) \tag{3.6}$$

Inspirons-nous de la sous-section 2.5. Reconnaissons d'abord que le lagrangien ci-haut a la forme voulue, sauf que la variable correspondant au champ scalaire dans (2.37) est plutôt $A_i/2c\sqrt{\pi}$. L'opérateur $\mathcal{D}$ est ici donné par $c^2\nabla^2$ et nous devons trouver les fonctions propres $u_n(\mathbf{r})$ correspondantes, tout en satisfaisant à la contrainte $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$. Il est clair que les fonctions propres auront la forme suivante :

$$u_n(\mathbf{r}) \to \hat{\mathbf{e}}(i,\mathbf{k})\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{3.7}$$

où $\hat{\mathbf{e}}(i,\mathbf{k})$ est un vecteur de polarisation, qui dépend de $\mathbf{k}$ et orthogonal à ce dernier :

$$\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{e}}(i,\mathbf{k}) = 0 \tag{3.8}$$

Comme il y a deux polarisations transverses possibles, l'indice i peut prendre les valeurs 1 et 2. La fréquence propre associée à cette fonction propre est la même pour les deux polarisations :

$$\boxed{\omega(\mathbf{k}) = c|\mathbf{k}|} \tag{3.9}$$

La relation d'orthogonalité des fonctions propres a maintenant une composante spatiale et une composante fonctionnelle :

$$\begin{aligned} &\int \mathrm{d}^3 r \ u_n^* u_m = \delta_{mn} \to \\ &\qquad \int \mathrm{d}^3 r \ \hat{\mathbf{e}}^*(i,\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{e}}(j,\mathbf{q})\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathrm{e}^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \delta_{ij}(2\pi)^3\delta(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \end{aligned} \tag{3.10}$$

L'analyse de la dynamique a essentiellement déjà été faite : à chaque vecteur d'onde $\mathbf{k}$ et à chaque polarisation ($i = 1, 2$) on associe un opérateur d'annihilation $a(i,\mathbf{k})$ qui satisfait aux relations de commutation

$$\begin{aligned} [a(i,\mathbf{k}), a^\dagger(j,\mathbf{q})] &= \delta_{ij}(2\pi)^3\delta(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \\ [a(i,\mathbf{k}), a(j,\mathbf{q})] &= 0 \end{aligned} \tag{3.11}$$

et en fonction duquel on peut exprimer le potentiel vecteur, selon la formule (1.20) ou (2.50):

$$\boxed{\mathbf{A} = c\sum_i^2 \int (\mathrm{d}^3 k) \ \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega(\mathbf{k})}}\left\{a(i,\mathbf{k})\hat{\mathbf{e}}(i,\mathbf{k})\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + a^\dagger(i,\mathbf{k})\hat{\mathbf{e}}^*(i,\mathbf{k})\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\right\}} \tag{3.12}$$

Il est souvent utile de supposer que l'espace est enfermé dans une boîte de volume V avec conditions aux limites périodiques. Dans ce cas, les vecteurs d'ondes $\mathbf{k}$ forment un ensemble discret et les fonctions propres peuvent être normalisées :

$$u_n(\mathbf{r}) \to \hat{\mathbf{e}}(i,\mathbf{k})\frac{1}{\sqrt{V}}\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{3.13}$$

Le développement en modes de $\mathbf{A}$ devient alors

$$\boxed{\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{c}{\sqrt{V}} \sum_{i,\mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{\mathbf{k}}}} \left\{ a_{i,\mathbf{k}} \hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}} \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + a^{\dagger}_{i,\mathbf{k}} \hat{\mathbf{e}}^{*}_{i,\mathbf{k}} \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right\}} \tag{3.14}$$

et les relations de commutation des opérateurs de création et d'annihilation deviennent

$$\begin{aligned} [a(i,\mathbf{k}), a^{\dagger}(j,\mathbf{q})] &= \delta_{ij}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}} \\ [a(i,\mathbf{k}), a(j,\mathbf{q})] &= 0 \end{aligned} \tag{3.15}$$

Le problème est donc résolu : les états propres de l'hamiltonien du champ électromagnétique dans le vide sont générés à partir du vide $|0\rangle$ à l'aide des opérateurs d'échelle. Les particules ainsi créées sont les *photons*. L'état $a^{\dagger}(i,\mathbf{k})|0\rangle$ représente donc un photon d'impulsion $\hbar\mathbf{k}$ et de polarisation donnée. La commutativité des opérateurs de création assurent que les photons sont bel et bien des bosons.

Parité du photon
Le potentiel vecteur, tout comme le champ électrique, est un vecteur polaire, qui change de signe lorsqu'on effectue une inversion de l'espace. L'effet de l'opérateur de parité Π est donc

$$\Pi\mathbf{E}\Pi = -\mathbf{E} \qquad \Pi\mathbf{A}\Pi = -\mathbf{A} \qquad \Pi a^{\dagger}(i,\mathbf{k})\Pi = -a^{\dagger}(i,\mathbf{k}) \tag{3.16}$$

Ceci implique qu'un état à un photon possède une parité -1 :

$$\Pi a^{\dagger}(i,\mathbf{k})|0\rangle = \Pi a^{\dagger}(i,\mathbf{k})\Pi\Pi|0\rangle = -a^{\dagger}(i,\mathbf{k})|0\rangle$$

On dit que le photon, en tant que particule, a une parité -1. Lorsqu'un photon est émis ou absorbé par un atome ou tout autre système matériel, la parité de l'état final de ce dernier doit donc être opposée à celle de l'état initial, si bien sûr l'hamiltonien total est invariant par inversion de l'espace.

3.3 Polarisations

Nous avons choisi des fonctions propres qui ont une impulsion bien déterminée : ce sont des fonctions propres de l'opérateur de translation. Nous aurions pu utiliser des fonctions propres réelles (c'est-à-dire exprimer les exponentielles complexes à l'aide de sinus et de cosinus) mais les quanta associés corresponderaient alors à des ondes stationnaires et non à des ondes progressives.

La même liberté existe aussi dans le choix des vecteurs de polarisation $\hat{\mathbf{e}}(i,\mathbf{k})$. Soit $\hat{\mathbf{z}}$ la direction de propagation du mode : $\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{z}}$ et soit $\hat{\mathbf{x}}$ et $\hat{\mathbf{y}}$ les deux autres vecteurs unité de la triade orthonormale. On peut alors choisir

$$\hat{\mathbf{e}}(1,\mathbf{k}) = \hat{\mathbf{x}} \qquad \hat{\mathbf{e}}(2,\mathbf{k}) = \hat{\mathbf{y}} \tag{3.17}$$

Un tel choix revient à décrire l'onde comme une superposition de polarisations linéaires. La relation d'orthogonalité

$$\hat{\mathbf{e}}^{*}(i,\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{e}}(j,\mathbf{k}) = \delta_{ij} \tag{3.18}$$

est évidemment satisfaite.

Il est cependant plus naturel d'utiliser une décomposition en fonctions de polarisations circulaires, en choisissant

$$\hat{\mathbf{e}}(+,\mathbf{k}) = (\hat{\mathbf{x}} + i\hat{\mathbf{y}})/\sqrt{2} \qquad \hat{\mathbf{e}}(-,\mathbf{k}) = (\hat{\mathbf{x}} - i\hat{\mathbf{y}})/\sqrt{2} \tag{3.19}$$

(on utilise les indices $\pm$ au lieu de 1,2). On vérifie que les relations d'orthogonalité sont encore satisfaites. Cette fois-ci, l'état $a^\dagger(\pm,\mathbf{k})|0\rangle$ a un moment cinétique bien déterminé selon $\hat{\mathbf{z}}$. En effet, la rotation $R(\hat{\mathbf{z}},\theta)$ appliquée sur $a^\dagger(i,k\hat{\mathbf{z}})|0\rangle$ n'agit en fait que sur les vecteurs $\hat{\mathbf{e}}$, produisant un facteur de phase :

$$R^\dagger(\hat{\mathbf{z}},\theta)a(\pm,k\hat{\mathbf{z}})R(\hat{\mathbf{z}},\theta) = \mathrm{e}^{i\pm\theta}a(\pm,k\hat{\mathbf{z}}) \tag{3.20}$$

On en déduit que

$$\begin{aligned} R(\hat{\mathbf{z}},\theta)a^\dagger(\pm,k\hat{\mathbf{z}})|0\rangle &= R(\hat{\mathbf{z}},\theta)a^\dagger(\pm,k\hat{\mathbf{z}})R(\hat{\mathbf{z}},-\theta)R(\hat{\mathbf{z}},\theta)|0\rangle \\ &= \mathrm{e}^{i\mp\theta}a^\dagger(\pm,k\hat{\mathbf{z}})|0\rangle \end{aligned} \tag{3.21}$$

D'après cette expression, les photons appartiennent à un multiplet de spin 1, auquel l'état $m = 0$ a été soustrait. En fait, l'état $m = 0$, s'il existait, serait associé à un vecteur de polarisation invariant par rapport à $R(\hat{\mathbf{z}},\theta)$, et donc parallèle à $\hat{\mathbf{z}}$. Or, une telle polarisation *longitudinale* est interdite par la contrainte $\nabla\cdot\mathbf{A} = 0$. Notons qu'on ne peut parler de rotations par rapport à d'autres axes que $\hat{\mathbf{z}}$ sans tomber dans certaines complications, car l'exposant $\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}$ est alors affecté par la transformation et la considération de plus d'une onde plane est alors nécessaire.

Il s'agit ici d'une propriété générale des particules de masse nulle et de spin s: seul les états $m = \pm s$ existent. On les appelle *états d'hélicité*, car leur moment cinétique est aligné sur la direction du mouvement. Ainsi, l'hypothétique *graviton* qui devrait jouer pour le champ gravitationnel le même rôle que le photon pour le champ électromagnétique est une particule de spin 2, car il provient de la quantification du tenseur métrique, qui est de rang 2, en comparaison du quadri-potentiel électromagnétique , qui est de rang 1 (vecteur). Cependant, le graviton ne peut exister qu'en deux polarisations, comme le photon, correspondant aux projections de spin ± 2.

4 Théorème de Noether

Nous avons démontré le théorème de Noether dans le cas d'un système ayant un nombre fini de degrés de liberté et possédant une symétrie continue. Nous allons maintenant voir quelle forme prend ce théorème dans le cas d'un système possédant un continuum de degrés de liberté. En particulier, nous étudierons le cas d'un champ scalaire complexe.

Dans ce qui suit $\eta_{\mu\nu}$ désigne le tenseur métrique de l'espace-temps (ici écrit en dimension 3+1):

$$\eta_{\mu\nu} \;=\; \mathrm{diag}(1,-1,-1,-1) \tag{4.1}$$

La notation relativiste sera employée, ce qui cependant ne restreint en aucun cas l'analyse qui suit aux théories avec invariance de Lorentz.

4.1 Transformations continues

En toute généralité, considérons un champ ou une collection de champ qu'on désignera par Φ. L'action dépendra en général de Φ et de ses dérivées premières :

$$S = \int \mathrm{d}x \; \mathcal{L}(\Phi, \partial_\mu \Phi) \tag{4.2}$$

On s'intéresse ici à l'effet sur l'action d'une transformation de symétrie affectant à la fois les coordonnées et le champ :

$$\begin{aligned} x &\to x' \\ \Phi(x) &\to \Phi'(x') \end{aligned} \tag{4.3}$$

Dans ces transformations la nouvelle position (x') est fonction de l'ancienne (x) et le nouveau champ Φ' à x' est exprimé en fonction de l'ancien champ Φ à x:

$$\boxed{\Phi'(x') = \mathcal{F}(\Phi(x))} \tag{4.4}$$

Ainsi le champ Φ, considéré comme une application de l'espace-temps vers un certain espace interne T ($\Phi \; : \mathbb{R}^d \to T$), est affecté par la transformation (4.3) de deux façons : par le changement $\Phi' = \mathcal{F}(\Phi)$ et par le changement d'argument $x \to x'$.

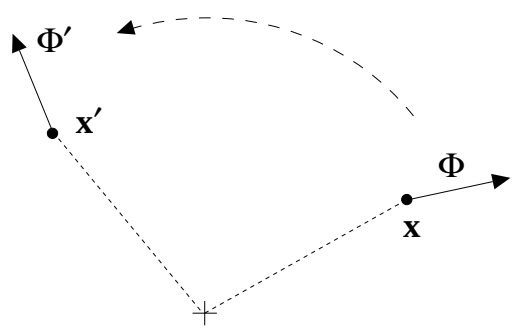


Figure 4.1. Transformation continue affectant à la fois la position x et le champ Φ: on illustre ici l'effet d'une rotation sur un champ vectoriel. Cette transformation 'active' peut aussi être considérée du point de vue 'passif', dans lequel c'est l'observateur qui adopte un nouveau système de coordonnées. Ceci explique pourquoi le nouveau champ $\Phi'(x')$ est exprimé en fonction de $\Phi(x)$ évalué à l'ancienne coordonnée.

La variation de l'action par la transformation (4.3) est obtenue en substituant à $\Phi(x)$ le nouveau champ Φ' *évalué à la même position* x. Autrement dit, la nouvelle action est

$$\begin{aligned} S' &= \int \mathrm{d}x \; \mathcal{L}(\Phi'(x), \partial_\mu \Phi'(x)) \\ &= \int \mathrm{d}x' \; \mathcal{L}(\Phi'(x'), \partial'_\mu \Phi'(x')) \\ &= \int \mathrm{d}x' \; \mathcal{L}(\mathcal{F}(\Phi(x)), \partial'_\mu \mathcal{F}(\Phi(x))) \\ &= \int \mathrm{d}x \; \left| \frac{\partial x'}{\partial x} \right| \mathcal{L}(\mathcal{F}(\Phi(x)), (\partial x^\nu / \partial x'^\mu) \partial_\nu \mathcal{F}(\Phi(x))) \end{aligned} \tag{4.5}$$

Considérons quelques exemples, en commençant par les translations d'espace et de temps, définies par

$$\begin{aligned} x' &= x + a \\ \Phi'(x+a) &= \Phi(x) \end{aligned} \tag{4.6}$$

Dans ce cas $\partial x^\nu / \partial x'^\mu = \delta^\nu_\mu$ et $\mathcal{F}$ est l'identité. Il s'ensuit que $S' = S$: l'action est invariante par translations, à moins bien sûr qu'elle ne dépende explicitement de la position.

Considérons ensuite la transformation d'échelle, définie par

$$\begin{aligned} x' &= \lambda x \\ \Phi'(\lambda x) &= \lambda^{-\Delta} \Phi(x) \end{aligned} \tag{4.7}$$

où λ est le facteur de dilatation et où Δ est la dimension d'échelle du champ Φ. Puisque le jacobien de cette transformation est $|\partial x' / \partial x| = \lambda^d$, l'action transformée est

$$S' = \lambda^d \int \mathrm{d}x \; \mathcal{L}(\lambda^{-\Delta}\Phi, \lambda^{-1-\Delta}\partial_\mu \Phi) \tag{4.8}$$

Considérons le cas particulier d'un champ scalaire sans masse φ dans une dimension d'espace-temps d:

$$S[\varphi] = \int \mathrm{d}x \; \partial_\mu \varphi \partial^\mu \varphi \tag{4.9}$$

On vérifie que cette action est invariante d'échelle, pourvu qu'on prenne

$$\Delta = \frac{1}{2} d - 1 \tag{4.10}$$

Une puissance φ^n peut être ajoutée au lagrangien tout en préservant l'invariance d'échelle si $\Delta n = d$, ou $n = 2d/(d-2)$. Les seules possibilités pour n pair sont un terme en φ^6 en $d = 3$ et un terme en φ^4 en $d = 4$.

Enfin, plusieurs transformations peuvent être définies qui n'affectent que les champs, sans affecter les coordonnées : ce sont les transformations dites *internes*. L'exemple le plus simple est celui d'une transformation de phase sur un champ complexe Φ: $\mathcal{F}(\Phi) = \mathrm{e}^{-i\omega}\Phi$.

4.2 Transformations infinitésimales et théorème de Noether

Étudions maintenant l'effet de transformations infinitésimales sur l'action. En général on écrit de telles transformations comme

$$\begin{aligned} x'^\mu &= x^\mu + \omega_a \frac{\delta x^\mu}{\delta \omega_a} \\ \Phi'(x') &= \Phi(x) + \omega_a \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \omega_a}(x) \end{aligned} \tag{4.11}$$

Ici $\{\omega_a\}$ est un ensemble de paramètres infinitésimaux que nous n'allons conserver qu'au premier ordre. On définit habituellement le *générateur* G_a de la tranformation par l'expression suivante pour une transformation infinitésimale au même point :

$$\boxed{\Phi'(x') = (1 - i\omega_a G_a)\Phi(x')} \tag{4.12}$$

On peut relier cette définition à l'éq. (4.11) en notant que, au premier ordre en ω_a,

$$\begin{aligned}\Phi'(x') &= \Phi(x) + \omega_a \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\omega_a}(x) \\ &= \Phi(x') - \omega_a \frac{\delta x^\mu}{\delta\omega_a}\partial_\mu\Phi(x') + \omega_a \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\omega_a}(x')\end{aligned} \tag{4.13}$$

L'expression explicite pour le générateur est donc

$$iG_a\Phi = \frac{\delta x^\mu}{\delta\omega_a}\partial_\mu\Phi - \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\omega_a} \tag{4.14}$$

Dans le cas d'une translation infinitésimale par un quadrivecteur ω^μ (l'indice a devient ici un indice d'espace-temps) on a $\delta x^\mu/\delta\omega^\nu = \delta^\mu_\nu$ et $\delta\mathcal{F}/\delta\omega^\nu = 0$. Donc le générateur des translations est simplement

$$\boxed{P_\nu = -i\partial_\nu} \tag{4.15}$$

De même, on vérifie facilement que le générateur d'une transformation de phase est l'unité.

Passons maintenant au théorème de Noether. Ce théorème, dans sa version continue, stipule qu'à chaque paramètre d'une transformation continue qui laisse l'action inchangée on peut associer un quadri-courant qui est conservé (c.-à-d. qui obéit à l'équation de continuité) lorsque les équations du mouvement sont satisfaites. Étant donné une telle symétrie de l'action, il y a invariance par la transformation (4.11) seulement si la transformation est *rigide*, c.-à-d. si les paramètres ω_a sont indépendants de la position. Une façon particulièrement élégante de démontrer le théorème de Noether consiste à supposer que la transfomation (4.11) n'est pas rigide, avec ω_a dépendant de la position.

À partir de la dernière des éqs (4.5) on peut écrire l'effet de la transformation infinitésimale (4.11). Au premier ordre, la matrice jacobienne est

$$\frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\mu} = \delta^\nu_\mu + \partial_\mu\left(\omega_a \frac{\delta x^\nu}{\delta\omega_a}\right) \tag{4.16}$$

Le déterminant de cette matrice peut être calculé au premier ordre à l'aide de la formule

$$\det(1+E) \;\approx\; 1 + \operatorname{Tr} E \qquad (E \text{ petit}) \tag{4.17}$$

On obtient

$$\left|\frac{\partial x'}{\partial x}\right| \;\approx\; 1 + \partial_\mu\left(\omega_a \frac{\delta x^\mu}{\delta\omega_a}\right) \tag{4.18}$$

Au premier ordre, la matrice jacobienne inverse s'obtient en inversant le signe de la transformation :

$$\frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu} = \delta^\nu_\mu - \partial_\mu\left(\omega_a \frac{\delta x^\nu}{\delta\omega_a}\right) \tag{4.19}$$

Après ces étapes préliminaires, l'action transformée S' peut être écrite comme

$$\begin{aligned}S' = \int \mathrm{d}x\; &\left(1 + \partial_\mu\left(\omega_a \frac{\delta x^\mu}{\delta\omega_a}\right)\right) \times \\ &\mathcal{L}\left(\Phi + \omega_a \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\omega_a}\;,\; \left[\delta^\nu_\mu - \partial_\mu(\omega_a(\delta x^\nu/\delta\omega_a))\right]\left(\partial_\nu\Phi + \partial_\nu\left[\omega_a(\delta\mathcal{F}/\delta\omega_a)\right]\right)\right)\end{aligned} \tag{4.20}$$

La variation $\delta S = S' - S$ contient des termes sans dérivées de ω_a. La somme de ces termes est nulle si l'action est invariante par rapport aux transformations rigides, ce que nous allons supposer. Alors δS ne contient que des termes proportionnels aux premières dérivées de ω_a, obtenus en développant le lagrangien en série de Taylor. On écrit

$$\delta S \;=\; -\int \mathrm{d}x\; j_a^\mu\; \partial_\mu \omega_a \tag{4.21}$$

où

$$\boxed{j_a^\mu = \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \Phi} \partial_\nu \Phi - \delta_\nu^\mu \mathcal{L} \right\} \frac{\delta x^\nu}{\delta \omega_a} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \Phi} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \omega_a}} \tag{4.22}$$

La quantité j_a^μ est le *courant* associé à la transformation infinitésimale (4.11). Une intégration par partie donne

$$\delta S \;=\; \int \mathrm{d}x\; \partial_\mu j_a^\mu\; \omega_a \tag{4.23}$$

Or, on sait que si les équations du mouvement sont satisfaites, alors l'action est stationnaire par rapport à toute variation des champs : c'est le principe de la moindre action. Autrement dit, δS devrait s'annuler pour n'importe laquelle fonction $\omega_a(x)$. Ceci mène forcément à la loi de conservation

$$\partial_\mu j_a^\mu \;=\; 0 \tag{4.24}$$

Ceci constitue le théorème de Noether pour les champs : à chaque symétrie continue de l'action on associe une densité ρ_a et une denstié de courant $\mathbf{J}_a$ qui satisfont à l'équation de continuité, représentant une quantité conservée. L'intégrale de la densité sur tout l'espace est une quantité constante :

$$Q_a = \int \mathrm{d}^3 r\; \rho_a(\mathbf{r}) \tag{4.25}$$

En effet, sa dérivée temporelle est

$$\begin{aligned} \dot{Q}_a = & \int \mathrm{d}^3 r\; \partial_t \rho_a \\ = & -\int \mathrm{d}^3 r\; \nabla \cdot \mathbf{J} \\ = & -\int_\infty \mathbf{J} \cdot d\mathbf{s} \end{aligned} \tag{4.26}$$

où $d\mathbf{s}$ est l'élément de surface orienté à l'infini. On conclut que $\dot{Q}_a = 0$ si $\mathbf{J}$ s'annule suffisamment rapidement à l'infini.

4.3 Tenseur d'énergie-impulsion

Comme premier exemple, considérons la densité et le courant associés à une translation infinitésimale. Étant donné que $\delta x^\mu / \delta \omega^\nu = \delta_\nu^\mu$ et $\delta \mathcal{F} / \delta \omega^\nu = 0$ dans ce cas, l'analogue de j_a^μ est le tenseur suivant :

$$T^\mu{}_\nu \;=\; -\delta_\nu^\mu \mathcal{L} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \Phi} \partial_\nu \Phi \tag{4.27}$$

L'équation de continuité associée est $\partial_\mu T^\mu{}_\nu = 0$ et la quantité conservée est notée

$$P_\nu \;=\; \int \mathrm{d}^3 r\; T^0{}_\nu \tag{4.28}$$

Nous avons vu que les générateurs des translation dans le temps et l'espace sont respectivement l'hamiltonien et l'impulsion totale. On en conclut que P_ν représente l'énergie ($\nu = 0$) et l'impulsion ($\nu = 1, 2, 3$) du champ. Explicitement, l'énergie est

$$P_0 \;=\; \int \mathrm{d}^3 r \; \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}} \dot{\Phi} - \mathcal{L} \right\} \tag{4.29}$$

ce qui est bien la définition usuelle de l'hamiltonien. Le vecteur d'impulsion est, lui,

$$\mathbf{P} \;=\; -\int \mathrm{d}^3 r \; \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}} \nabla \Phi \tag{4.30}$$

Le signe $-$ provient de ce que la quadri-impulsion avec indices covariants est $P_\mu = (E, -\mathbf{P})$.

Considérons comme exemple un champ scalaire simple, invariant par rapport aux translations. Sa densité lagrangienne est

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}(\partial_t \phi)^2 - \frac{1}{2} v^2 (\nabla \phi)^2 - \frac{1}{2} \mu^2 \phi^2 \tag{4.31}$$

L'impulsion du champ est alors

$$\mathbf{P} \;=\; -\int \mathrm{d}^3 r \; \partial_t \phi \nabla \phi \tag{4.32}$$

En substituant le développement en modes (2.52) on montre facilement que

$$\mathbf{P} = \int (\mathrm{d}^3 p) \; \hbar \mathbf{p} \; a^\dagger(\mathbf{p}) a(\mathbf{p}) \tag{4.33}$$

Ceci confirme que cette quantité est l'impulsion associée au champ, ce qui est intuitivement clair.

4.4 Champ scalaire complexe

Notre deuxième exemple est celui d'un champ scalaire complexe, dont le lagrangien peut être écrit ainsi :

$$\mathcal{L} = \frac{\partial \phi^*}{\partial t} \frac{\partial \phi}{\partial t} - v^2 \nabla \phi^* \cdot \nabla \phi - \mu^2 \phi^* \phi \tag{4.34}$$

Un tel champ peut être considéré comme une combinaison de deux champs scalaires réels découplés : $\phi = (\phi_1 + i\phi_2)/\sqrt{2}$. Chacun des deux champs ϕ_1 et ϕ_2 possède un lagrangien de la forme (2.33) et peut être développé en opérateurs de création et d'annihilation selon l'Éq. (2.52). Soit $a_1(\mathbf{k})$ et $a_2(\mathbf{k})$ les opérateurs d'annihilation associés à ϕ_1 et ϕ_2. On définit les opérateurs

$$\begin{aligned} a(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(a_1(\mathbf{k}) + i a_2(\mathbf{k}) \right) \\ d(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(a_1(\mathbf{k}) - i a_2(\mathbf{k}) \right) \end{aligned} \tag{4.35}$$

On vérifie que ces opérateurs satisfont aux relations de commutation habituelles des opérateurs de création et d'annihilation :

$$[a(\mathbf{k}), a^\dagger(\mathbf{q})] = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \qquad\qquad [d(\mathbf{k}), d^\dagger(\mathbf{q})] = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \tag{4.36}$$

(les autres commutateurs sont nuls). Le champ complexe ϕ admet alors le développement suivant :

$$\phi(\mathbf{r}) = \int (\mathrm{d}^3 p) \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\mathbf{p})}} \; \left\{ a(\mathbf{p}) \mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} + d^\dagger(\mathbf{p}) \mathrm{e}^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \right\} \tag{4.37}$$

Tableau 4.1 Sommaire des transformations et courants associés à diverses symétries.

symétrie	transformation finie	transfo. infinitésimale	générateur	cou
translations	$x'^{\mu} = x^{\mu} + a^{\mu}$	$\frac{\delta x^{\mu}}{\delta a^{\nu}} = \delta^{\mu}_{\nu}$	$P_{\nu} = -i\partial_{\nu}$	$T^{\mu}{}_{\nu}$

L'hamiltonien peut être exprimé ainsi en fonction de $a(\mathbf{p})$ et $d(\mathbf{p})$:

$$H = \int (\mathrm{d}^3 p)\ \hbar\omega(\mathbf{p}) \Big\{ a^\dagger(\mathbf{p}) a(\mathbf{p}) + d^\dagger(\mathbf{p}) d(\mathbf{p}) \Big\} \tag{4.38}$$

Le lagrangien ci-haut est invariant par rapport aux changements de phase $\phi \to \mathrm{e}^{-i\omega}\phi$. Les changements fonctionnels de ϕ et ϕ^* sont

$$\frac{\delta\phi}{\delta\omega} = -i\phi \qquad\qquad \frac{\delta\phi^*}{\delta\omega} = i\phi^* \tag{4.39}$$

Il s'ensuit que la densité conservée est $\rho = i(\dot{\phi}^*\phi - \dot{\phi}\phi^*)$ et que la charge conservée est

$$Q = i \int \mathrm{d}^3 r\ (\dot{\phi}^*\phi - \dot{\phi}\phi^*) \tag{4.40}$$

En utilisant ce développement en modes, on montre facilement que la charge conservée est, modulo une constante additive et une constante multiplicative,

$$Q = \int (\mathrm{d}^3 p)\ \Big\{ a^\dagger(\mathbf{p}) a(\mathbf{p}) - d^\dagger(\mathbf{p}) d(\mathbf{p}) \Big\} \tag{4.41}$$

Cela démontre que les quanta de type a possèdent une charge positive unité, alors que les quanta de type d ont une charge opposée. Sauf sur ce point, les deux types de quanta sont identiques. Les quanta d sont en fait les *antiparticules* des quanta a. La charge conservée que nous venons de construire est en fait la charge électrique; nous verrons plus tard comment la conservation de la charge électrique est liée à l'invariance de phase et comment seuls les quanta d'un champ complexe peuvent interagir avec le champ électromagnétique . En pratique, un champ scalaire complexe représentant des bosons est utile dans la description de la supraconductivité (modèle de Landau-Ginzburg) et dans le modèle standard des interactions électro-faibles (champ de Higgs).

Problème 4.1 *Phonons optiques*

Une chaîne linéaire d'oscillateurs (1 dimension) comporte une cellule élémentaire composée de deux atomes; la force de rappel est $m\omega^2$ entre les deux atomes d'une même cellule, et $m\Omega^2$ entre les atomes voisins appartenant à des cellules différentes. En clair, l'hamiltonien peut s'écrire

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left\{ \frac{P_i^2}{2m} + \frac{Q_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 (X_i - Y_i)^2 + \frac{1}{2} m\Omega^2 (Y_i - X_{i+1})^2 \right\}$$

où P_i et Q_i sont les impulsions des deux atomes associés à la i^e position du réseau, alors que X_i et Y_i sont les coordonnées correspondant respectivement à P_i et Q_i. On a les relations de commutation habituelles.

Effectuez la diagonalisation de cet hamiltonien à l'aide de transformées de Fourier discrètes (c.-à-d. définissez les opérateurs de création et d'annihilations appropriés) et illustrez la relation de dispersion en fonction de l'impulsion. Expliquez ce qui se produit quand $\omega = \Omega$, en comparant avec la chaîne d'oscillateurs ordinaire.

Problème 4.2 *Moment cinétique du champ électromagnétique*

La densité d'impulsion du moment cinétique est proportionnelle au vecteur de Poynting : $\mathbf{S}/c^2 = (1/4\pi c)\mathbf{E}\wedge\mathbf{B}$. Il est donc naturel de s'attendre à ce que le moment cinétique associé au champ électromagnétique soit donné par l'expression suivante :

$$\mathbf{L} = \frac{1}{4\pi c}\int \mathrm{d}^3 r \;\; \mathbf{r}\wedge(\mathbf{E}\wedge\mathbf{B}) \tag{4.42}$$

a) Dans le jauge de Coulomb, démontrez que $\mathbf{L}$ peut s'écrire ainsi :

$$\mathbf{L} = \frac{1}{4\pi c}\int \mathrm{d}^3 r \;\; \left\{\mathbf{E}\wedge\mathbf{A} + \sum_i E_i(\mathbf{r}\wedge\nabla)A_i\right\} \tag{4.43}$$

Le deuxième terme ci-haut est interprété comme le moment cinétique orbital $\mathbf{L}_{orb}$ du champ, en raison de la présence de l'opérateur différentiel $\mathbf{r}\wedge\nabla$, alors que le premier représente le moment cinétique intrinsèque $\mathbf{L}_{spin}$.

b) En fonction des opérateurs de création et d'annihilation associés aux polarisations circulaires $a(\pm,\mathbf{k})$ et $a^\dagger(\pm,\mathbf{k})$, démontrez la représentation suivante pour l'opérateur de moment cinétique intrinsèque :

$$\mathbf{L}_{spin} = \int (\mathrm{d}^3 k)\;\hat{\mathbf{k}}\left\{a^\dagger(+,\mathbf{k})a(+,\mathbf{k}) - a^\dagger(-,\mathbf{k})a(-,\mathbf{k})\right\} \tag{4.44}$$

où $\hat{\mathbf{k}}$ est le vecteur unité dans la direction de $\mathbf{k}$.

Problème 4.3 *État cohérent de rayonnement*

Un état cohérent du champ électromagnétique peut en général être spécifié par une fonction complexe $f_{i,\mathbf{k}}$ du vecteur d'onde (considéré comme discret dans ce problème) et de la polarisation :

$$|f_{i,\mathbf{k}}\rangle = \left[\exp\sum_{i,\mathbf{k}}\left(f_{i,\mathbf{k}}a^\dagger_{i,\mathbf{k}} - f^*_{i,\mathbf{k}}a_{i,\mathbf{k}}\right)\right]|0\rangle \tag{4.45}$$

En fonction de $f_{i,\mathbf{k}}$, donnez une expression pour la valeur moyenne du champ électrique $\langle\mathbf{E}\rangle$ et la valeur moyenne du moment cinétique intrinsèque (donné à l'Éq. (4.44) ci-dessus) $\langle\mathbf{L}_{spin}\rangle$ dans cet état cohérent.

Problème 4.4 *Émission de phonons par une source classique*

Considérons un hamiltonien $H = H_0 + H_1$, où H_0 est l'hamiltonien du champ scalaire $\phi(\mathbf{r})$, sans masse, en dimension trois, représentant une version simplifiée d'un réseau d'ions en oscillation dans la limite continue. La perturbation H_1 représente une force harmonique $f(\mathbf{r})\mathrm{e}^{-i\omega t}$ agissant sur le système avec plus ou moins d'intensité selon les positions. Cette force est couplée directement au déplacement de chaque ion à la position $\mathbf{r}$. On écrit donc, dans la limite continue,

$$H_1 = \mathrm{e}^{-i\omega t}\int \mathrm{d}^3 r \;\phi(\mathbf{r})f(\mathbf{r}) \tag{4.46}$$

On peut supposer que cette perturbation est absente avant un certain instant, avant quoi le système est dans son état fondamental.

Calculez le taux de production de quanta de vecteur d'onde $\mathbf{k}$ à partir du vide, dû à la force extérieure $f(\mathbf{r})$. Il est utile de placer le système dans une boîte de volume V et de définir le coefficient de Fourier

$$f_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}}\int \mathrm{d}^3 r \;f(\mathbf{r})\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{4.47}$$

Problème 4.5 *Impureté dans la chaîne d'oscillateurs*

L'hamiltonien d'une chaîne linéaire d'ions reliés par des forces harmoniques est donné par l'éq. (1.31) des notes de cours. Supposons maintenant qu'un des N ions, situé par exemple à la position $n = 0$, ait une masse M légèrement différente de la masse commune m des autres ions. Par ailleurs, la force de rappel élastique entre cet ion et ses voisins est la même qu'entre les autres paires d'ions voisins (on peut supposer, par exemple, que cet ion d'impureté est chimiquement identique aux autres, mais provient d'un isotope différent). On définira la petite quantité

$$\gamma = \left(\frac{1}{M} - \frac{1}{m}\right)$$

a) Écrivez l'hamiltonien sous la forme $H = H_0 + V$, où H_0 est l'hamiltonien de la chaîne d'ions avec toutes les masses égales. Exprimez le résultat en fonction des opérateurs de création et d'annihilation.

b) Calculez, au premier ordre en γ, le déplacement de l'énergie du niveau fondamental dû à cette inhomogénéité.

c) Calculez, au premier ordre, le taux de transition d'un état à un phonon $|p\rangle$ vers un autre état à un phonon $|p'\rangle$. Quelles sont les (ou la) transitions permises ?

Problème 4.6 *Interaction phonon-phonon*

Considérons la chaîne linéaire d'oscillateurs où chaque interaction ion-ion reçoit maintenant une correction anharmonique cubique. Le lagrangien est

$$L = \sum_n \left[\frac{1}{2}\dot{q}_n^2 - \frac{1}{2}\Omega^2(q_n - q_{n+1})^2 - \gamma(q_n - q_{n+1})^3\right]$$

On suppose que γ est petit et le terme cubique est considéré comme une perturbation.

a) Démontrez que la perturbation (appelons-la V), s'exprime comme suit en fonction des opérateurs de création et d'annihilation de phonons :

$$V = \frac{i\gamma}{\Omega^3\sqrt{N}}\left(\frac{\hbar}{2}\right)^{3/2}\sum_{p,q}{}' \sqrt{\omega_p\omega_q\omega_{p+q}}\left\{a_p a_q a_{-p-q} + 3a_{p+q}^\dagger a_p a_q - c.h.\right\}$$

où la notation $\sum'$ signifie que le mode de fréquence nulle est exclu de la somme.

b) En principe, cette perturbation V permet des transitions au cours desquelles un phonon se scinde en deux phonons. Connaissant la relation de dispersion des phonons, ce processus est-il possible ici? (c.-à-d. conserve-t-il l'énergie?)

c) Considérez le processus par lequel deux phonons de nombres d'onde p et q ont une collision élastique et en ressortent avec des nombres d'onde p' et q'. Ce processus est-il permis par la perturbation V au premier ordre ? Au deuxième ordre ? Si oui, par quel terme et quel état intermédiaire précisément?

Problème 4.7 *Interaction électron-phonon en une dimension*

Considérons l'hamiltonien suivant, décrivant le mouvement des électrons (sans spin) et des ions dans un réseau unidimensionnel :

$$H = \sum_n t\left(c_n^\dagger c_{n+1} + c_{n+1}^\dagger c_n\right) + \sum_n \left\{\frac{P_n^2}{2M} + \frac{1}{2}M\Omega^2(X_n - X_{n+1})^2\right\}$$

où c_n annihile un électron au site n, X_n est la déviation de l'atome au site n par rapport à sa position d'équilibre, M est la masse des ions et P_n l'impulsion de l'ion au site n. L'hamiltonien d'interaction entre les électrons et les phonons provient de ce que l'intégrale de saut t n'est pas constante, mais dépend de la distance entre les sites. Au premier ordre, on peut écrire

$$t = t_0 + g(X_n - X_{n+1})$$

où t_0 et g sont des constantes réelles. t_0 est l'intégrale de saut quand la distance intersite est a, le pas de réseau, et intervient dans l'hamiltonien non perturbé, alors que g intervient dans l'hamiltonien d'interaction électron-phonon.

a) En vous servant des développements appropriés, montrez que l'hamiltonien d'interaction électron-phonon H_I peut s'écrire ainsi :

$$H_I = iga\sqrt{\frac{2\hbar}{NM}}\int_{\text{Z.B.}}(\mathrm{d}k)(\mathrm{d}k')\frac{1}{\sqrt{\omega_{k-k'}}}\left[\sin(k'a)-\sin(ka)\right]\left[a_{k-k'}+a^\dagger_{-k+k'}\right]c^\dagger_k c_{k'}$$

où ω_k est la fréquence du phonon de vecteur d'onde k, N est le nombre de sites, a_q annihile un phonon de vecteur d'onde q et c_k annihile un électron de vecteur d'onde k.

b) Montrez que, sous cette forme, H_I est hermitique et expliquez, en une ou deux phrases, comment il conserve l'impulsion totale.

c) En supposant que le système soit dans son état fondamental (i.e. la mer de Fermi et le vide des phonons), quelle sera la correction à l'énergie E_0 du fondamental apportée par H_I au permier ordre? Quels états contribueront à la correction à E_0 au deuxième ordre en théorie des perturbations?

Problème 4.8 *Interaction électron-phonon*

Considérons l'hamiltonien $H = H_0 + V$ suivant, qui décrit des électrons en interaction avec des phonons dans un solide (oublions le spin des électrons):

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}}\varepsilon_{\mathbf{k}}c^\dagger_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}}\omega_{\mathbf{q}}a^\dagger_{\mathbf{q}}a_{\mathbf{q}} \qquad V = i\sum_{\mathbf{q}}D_{\mathbf{q}}(a_{\mathbf{q}}\rho^\dagger_{\mathbf{q}} - a^\dagger_{\mathbf{q}}\rho_{\mathbf{q}})$$

où:
$c_{\mathbf{k}}$ annihile un électron de vecteur d'onde $\mathbf{k}$ et d'énergie $\varepsilon_{\mathbf{k}}$.
$a_{\mathbf{q}}$ annihile un phonon de vecteur d'onde $\mathbf{q}$ et d'énergie $\omega_{\mathbf{q}}$.
$D_{\mathbf{q}}$ est une fonction de $\mathbf{q}$ qui caractérise la force d'interaction entre les électrons et les phonons.
$\rho_{\mathbf{q}}$ est l'opérateur de la densité des électrons, en transformée de Fourier :

$$\rho_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}}c^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}c_{\mathbf{k}}$$

Les opérateurs de création et d'annihilation satisfont aux relation de commutation suivantes :

$$\{c_{\mathbf{k}}, c^\dagger_{\mathbf{k}'}\} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \qquad [a_{\mathbf{q}}, a^\dagger_{\mathbf{q}'}] = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}$$

a) Montrez que le nombre total d'électrons est conservé par cet hamiltonien, mais pas le nombre de phonons.

b) Considérez un état à un fermion $|\mathbf{k}\rangle = c^\dagger_{\mathbf{k}}|0\rangle$, d'énergie non perturbée $E = \varepsilon_{\mathbf{k}}$. La perturbation V modifie cette énergie. Quelle est la correction à E au **premier** ordre de la théorie des perturbations? Donnez une expression de la correction à E au **deuxième** ordre de la théorie des perturbations.

c) Expliquez comment calculer la section différentielle de diffusion électron-électron causée par l'interaction électron-phonon. Ne faites pas le calcul, mais indiquez seulement les éléments suivants : (1) Montrez que l'amplitude de diffusion s'annule au premier ordre. (2) Indiquez quels états intermédiaires contribuent à l'amplitude au deuxième ordre.

Problème 4.9 *Commutateur de* **E** *avec* **B**

a) Montrez que les vecteur orthonormaux de polarisation du champ électromagnétique satisfont à la relation de complétude suivante :

$$\sum_{i=1,2}\mathrm{e}^*_a(i,\mathbf{k})e_b(i,\mathbf{k}) = \delta_{ab} - \frac{k_a k_b}{k^2}$$

Ici e_a est la composante du vecteur $\hat{\mathbf{e}}$ selon l'axe des x_a ($a = 1, 2, 3$). Cette relation est utile dans la partie suivante.

b) Démontrez que les champs électrique et magnétique satisfont aux relations de commutation suivantes aux temps égaux :

$$[E_a(\mathbf{r}), B_b(\mathbf{r}')] = -4\pi c i\hbar\varepsilon_{abc}\frac{\partial}{\partial x_c}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

Problème 4.10 *Rayonnement par une source classique*

Dans ce problème nous motiverons l'emploi d'états cohérents en montrant que ces derniers proviennent du rayonnement émis par une source classique de courant. Par une source classique on entend une densité de courant $\mathbf{J}(\mathbf{r},t)$ provenant d'un état de matière aux fluctuations quantiques négligeables. L'hamiltonien du système peut alors s'écrire comme suit :

$$H = H_0 - \frac{1}{c}\int \mathrm{d}^3r\ \mathbf{J}(\mathbf{r},t)\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$$

où $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ est l'opérateur de potentiel vecteur (dépendant du temps dans le point de vue de Heisenberg) et H_0 est l'hamiltonien du champ électromagnétique libre, c'est-à-dire en l'absence de courant. On supposera ici que le courant est nul pour $t<0$ et que le champ électromagnétique est dans son état fondamental (le vide $|0\rangle$) à $t=0$.

a) Obtenez l'équation du mouvement suivante pour l'opérateur d'annihilation $a(i,\mathbf{k})$ (associé à la fréquence $\omega(\mathbf{k})$) dans le point de vue de Heisenberg :

$$\dot{a}(\mathbf{k},t) = -i\omega a(\mathbf{k},t) + is(\mathbf{k},t)$$

où la fonction $s(\mathbf{k},t)$ est définie par

$$s(\mathbf{k},t) = \sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega(\mathbf{k})}}\int \mathrm{d}^3r\ \mathbf{J}(\mathbf{r},t)\cdot\hat{\mathbf{e}}^*(i,\mathbf{k})\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

b) Montrez que la solution de cette équation est

$$a(\mathbf{k},t) = a(\mathbf{k},0)\mathrm{e}^{-i\omega t} + i\int_0^t \mathrm{d}t'\ \mathrm{e}^{-i\omega(t-t')}s(\mathbf{k},t')$$

c) En retournant dans le point de vue de Schrödinger, montrez que l'état du champ pour $t>0$ est un état cohérent (pour ce faire appliquez la dernière équation à l'état $|0\rangle$ et changez de point de vue).

Problème 4.11 *Effet Casimir*

L'état fondamental du champ électromagnétique (le vide $|0\rangle$) possède une énergie E_0 (l'énergie du vide). Cette énergie n'est pas observable en soi : seules les différences d'énergies sont en général observables. Cependant, un changement dans les conditions aux limites macroscopiques peut induire un déplacement du niveau fondamental; par exemple, l'énergie du vide du champ électromagnétique est modifiée par l'introduction de conducteurs macroscopiques. Ce déplacement du niveau fondamental induit une force sur les conducteurs : c'est l'*effet Casimir* (H.B.G. Casimir, 1948).

Considérons deux plaques carrées parallèles d'un conducteur parfait, de côté L, séparées par une distance a. Choisissons l'axe des z perpendiculaire aux plaques. La composante k_z du vecteur d'onde $\mathbf{k}$ des modes du champ ne peut prendre alors qu'un ensemble discret de valeurs. Dans ce qui suit on négligera complètement les effets de bord, c.-à-d. on supposera que $L \gg a$.

a) En tenant compte des conditions aux limites sur les plaques, montrez que l'énergie du vide dans le volume situé entre les plaques est formellement donnée par

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar c L^2 \int \frac{\mathrm{d}^2k_\parallel}{(2\pi)^2}\left[|\mathbf{k}_\parallel| + 2\sum_{n=1}^{\infty}\sqrt{\mathbf{k}_\parallel^2 + \frac{n^2\pi^2}{a^2}}\right]$$

Ici $\mathbf{k}_\parallel$ est la composante du vecteur d'onde parallèle aux plaques. (n'oubliez pas de compter les polarisations permises du champ, en particulier dans le cas $k_z=0$ où les conditions aux limites du champ électrique sont importantes). L'expression précédente est infinie, en raison de la limite supérieure de la somme et de l'intégrale. Ce qui nous intéresse est cependant la *différence* entre cette énergie et l'énergie du vide sans les plaques. Pour calculer cette dernière, on remplace la somme sur n par une intégrale, puisque les restrictions sur k_z sont levées.

b) Montrez que le déplacement d'énergie $\mathcal{E}$ par unité de surface, c'est-à-dire la différence entre la densité d'énergie avec et sans les plaques, est donné par

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar c}{2\pi} \int_0^\infty \mathrm{d}k\ k \left\{ \frac{1}{2}k + \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{k^2 + n^2\pi^2/a^2} - \int_0^\infty \mathrm{d}n\ \sqrt{k^2 + n^2\pi^2/a^2} \right\}$$

Encore une fois, le calcul de cette quantité est impossible tel quel, en raison des bornes d'intégration supérieures, quoique la quantité soit en principe finie. Pour régler ce problème, on introduit une fonction de coupure $f(k)$ telle que $f(k) = 1$ pour k suffisamment petit, et $f(k) = 0$ pour k suffisamment grand, avec une transition continue et différentiable entre ces deux extrêmes. Cette transition s'effectue naturellement pour des nombres d'ondes typiques des longueurs atomiques, en-deçà desquelles les conditions aux limites macroscopiques ne sont plus valables. On introduit donc dans les intégrales et les sommes un facteur $f(|\mathbf{k}|)$.

c) Montrez que

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar c \pi^2}{4a^3} \left(\frac{1}{2}F(0) + F(1) + F(2) + \cdots - \int_0^\infty \mathrm{d}n\ F(n) \right)$$

où on a défini

$$F(n) = \int_0^\infty \mathrm{d}u \sqrt{u + n^2}\ f\left(\frac{\pi}{a} \sqrt{u + n^2} \right)$$

d) Utilisez la formule d'Euler-MacLaurin[1] pour évaluer l'expression ci-haut pour $\mathcal{E}$. En supposant que toutes les dérivées de f s'annulent à 0, montrez que $F'''(0) = -4$ et que les autres dérivées à l'origine de F sont nulles. Montrez ensuite que

$$\mathcal{E} = -\frac{\pi^2 \hbar c}{720 a^3}$$

La pression d'attraction sur les plaques qui résulte de cette densité superficielle d'énergie est donc

$$P = -\frac{\pi^2 \hbar c}{240 a^4}$$

Cet effet est petit, mais a été observé expérimentalement (M.J. Sparnaay, Physica **24** (1958) 751). Il a aussi été observé précisément entre une sphère et un plan conducteurs (S.K. Lamoreaux, Phys. Rev. Lett. **78** (1997) 5).

[1] Si vous ignorez ce qu'est la formule d'Euler-MacLaurin, renseignez-vous!

CHAPITRE 7

Interactions lumière-matière

Dans ce chapitre on étudie les processus d'émission, d'absorption et de diffusion de la lumière par un système matériel. Les deux composantes du système (matière et champ électromagnétique) sont décrits par la mécanique quantique. On parle donc de création de photons (émission), d'annihilation de photons (absorption) ou des deux (diffusion).

Remarquons qu'une description imparfaite de ces processus peut être obtenue en ne quantifiant que l'une des deux composantes du système, l'autre étant décrite par une configuration classique, sans être considérée comme une variable dynamique. Par exemple, on peut étudier l'effet d'un champ électrique oscillant sur un atome quantifié, en utilisant la méthode de la sous-section 2.5. En contrepartie, on peut aussi étudier l'émission de photons (quantifiés) par une source matérielle non quantifiée (cf. Ex. 4.10). Dans les deux cas, la méthode est justifiée si les objets classiques sont suffisamment complexes (c'est-à-dire macroscopiques) pour permettre ce genre de description. Pour comprendre le processus microscopique d'interaction lumière-matière, il faut cependant une description quantique des deux composantes du système, ce qui est expliqué dans ce chapitre.

1 Hamiltonien d'interaction

Le but de cette section est de justifier l'hamiltonien (7.22) décrivant l'interaction lumière-matière. On commence par établir l'équivalence du couplage minimal et de la force de Lorentz classique. On discute ensuite de l'invariance de jauge et de la manière générale d'introduire le champ électromagnétique dans un système matériel. Enfin, on introduit la notion de courant paramagnétique, essentielle à la description de l'interaction entre le champ électromagnétique quantifié et la matière qui n'est pas deuxième-quantifiée.

1.1 Force de Lorentz

En présence de champs électrique et magnétique, une particule de charge électrique e subit, en physique classique, une force donnée par la formule de Lorentz (ici dans le système gaussien):

$$\mathbf{F} = e\mathbf{E} + \frac{e}{c}\mathbf{v} \wedge \mathbf{B} \tag{1.1}$$

Le but de cette section est de démontrer que le lagrangien qui conduit à cette formule a la forme suivante :

$$L = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + \frac{e}{c}\mathbf{A} \cdot \mathbf{v} - e\phi \tag{1.2}$$

où $\mathbf{A}$ est le potentiel-vecteur et ϕ est le potentiel électrique.

Pour démontrer cela, calculons d'abord le moment conjugué:

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = m\mathbf{v} + \frac{e}{c}\mathbf{A} \tag{1.3}$$

Notons que ce moment conjugué n'est plus égal à la quantité de mouvement $m\mathbf{v}$. L'équation de Lagrange est alors

$$\begin{aligned} m\dot{p}_i &= m\dot{v}_i + \frac{e}{c}\left\{\frac{\partial A_i}{\partial t} + \frac{\partial A_i}{\partial x_j}\frac{\mathrm{d}x_j}{\mathrm{d}t}\right\} \\ &= \frac{\partial L}{\partial x_i} = -e\frac{\partial \phi}{\partial x_i} + \frac{e}{c}v_j\frac{\partial A_j}{\partial x_i} \end{aligned} \tag{1.4}$$

(la convention de sommation sur les indices répétés est utilisée). Cette équation peut aussi s'écrire

$$\begin{aligned} m\dot{v}_i &= e\left(-\partial_i\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial A_i}{\partial t}\right) + \frac{e}{c}\left(v_j\partial_i A_j - v_j\partial_j A_i\right) \\ &= eE_i + \frac{e}{c}\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{klm}v_j\partial_l A_m \\ &= eE_i + \frac{e}{c}(\mathbf{v}\wedge\mathbf{B})_i \end{aligned} \tag{1.5}$$

où nous avons utilisé l'expression (3.0) des champs en fonction des potentiels. Nous retrouvons donc la force de Lorentz, ce qui prouve la légitimité du lagrangien (1.2).

L'hamiltonien associé à ce lagrangien se trouve de la manière habituelle :

$$\begin{aligned} H &= \mathbf{p}\cdot\mathbf{v} - L \\ &= \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + e\phi \\ &= \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c\right)^2 + e\phi \end{aligned} \tag{1.6}$$

En mécanique quantique, il faut remplacer $\mathbf{p}$ par l'opérateur correspondant $\mathbf{P}$ et remplacer l'argument $\mathbf{r}$ de $\mathbf{A}$ par l'opérateur de position $\mathbf{R}$:

$$\boxed{H = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{P} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{R})\right)^2 + e\phi(\mathbf{R})} \tag{1.7}$$

En développant le carré, on doit tenir compte du fait que $\mathbf{P}$ ne commute pas avec $\mathbf{R}$:

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} - \frac{e}{2mc}(\mathbf{P}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{R}) + \mathbf{A}(\mathbf{R})\cdot\mathbf{P}) + \frac{e^2\mathbf{A}^2(\mathbf{R})}{2mc^2} + e\phi(\mathbf{R}) \tag{1.8}$$

1.2 Couplage minimal et invariance de jauge

Remarquons que le couplage d'une particule au champ électromagnétique peut se faire en suivant la prescription suivante :

$$\mathbf{p} \to \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \quad \text{et} \quad H \to H - e\phi \tag{1.9}$$

Dans l'équation de Schrödinger (représentation en coordonnées) cela revient à faire les substitutions suivantes :

$$\boxed{\begin{aligned} &\nabla \to \boldsymbol{\mathcal{D}} \equiv \nabla - \frac{ie}{c\hbar}\mathbf{A} \\ &\frac{\partial}{\partial t} \to \mathcal{D}_t \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \frac{ie}{\hbar}\phi \end{aligned}} \tag{1.10}$$

Les opérateurs $\boldsymbol{\mathcal{D}}$ et $\mathcal{D}_t$ sont appelés *dérivées covariantes*. En fonction de ces opérateurs différentiels, l'équation de Schrödinger prend la forme suivante :

$$i\hbar\mathcal{D}_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\mathcal{D}}^2\psi \tag{1.11}$$

La prescription qui consiste à remplacer les dérivées ordinaires par des dérivées covariantes porte le nom de *couplage minimal*. Elle garantie l'invariance de l'équation de Schrödinger par rapport aux transformations de jauge. En effet, ces dernières ont l'effet suivant sur les potentiels :

$$\mathbf{A} \to \mathbf{A} - \nabla\xi \qquad\qquad \phi \to \phi + \frac{1}{c}\frac{\partial\xi}{\partial t} \tag{1.12}$$

Pour que n'importe laquelle équation différentielle pour une quantité ψ (telle la fonction d'onde) soit invariante de jauge, il suffit que le couplage minimal soit utilisé et que la fonction ψ se transforme ainsi :

$$\boxed{\psi \to \mathrm{e}^{-ie\xi/\hbar c}\psi} \tag{1.13}$$

Comme ξ dépend de la position et du temps en général, il s'agit d'un changement de phase *local*, par opposition à *global*. La propriété principale des dérivées covariantes est la *covariance* sous transformation de jauge, c'est-à-dire que, lors d'une transformation de jauge, les dérivées covariantes sont modifiées par un simple facteur de phase local :

$$\mathcal{D}_t\psi \to \mathrm{e}^{ie\xi/\hbar c}\mathcal{D}_t\psi \qquad\qquad \boldsymbol{\mathcal{D}}\psi \to \mathrm{e}^{ie\xi/\hbar c}\boldsymbol{\mathcal{D}}\psi \tag{1.14}$$

Il est alors manifeste que l'équation de Schrödinger est invariante par transformation de jauge.

Le couplage minimal prend une apparence plus naturelle dans la notation relativiste des quadrivecteurs. Le quadrivecteur du potentiel est alors $A_\mu = (\phi, -\mathbf{A})$ et le quadrigradient est $\partial_\mu = ((1/c)\partial_t, \nabla)$. Une transformation de jauge s'écrit alors comme

$$A_\mu \to A_\mu + \partial_\mu\xi \qquad \psi \to \mathrm{e}^{-ie\xi/\hbar c}\psi \tag{1.15}$$

alors que la quadridérivée covariante, elle, s'écrit

$$\mathcal{D}_\mu \equiv \partial_\mu + \frac{ie}{c\hbar}A_\mu \tag{1.16}$$

On sait qu'en mécanique quantique la fonction d'onde peut être multipliée par une phase *globale* sans en modifier le sens physique. On apprend ici que la fonction d'onde d'une particule chargée peut être multipliée par une phase *locale* sans non plus modifier son sens physique, pourvu que cette multiplication s'accompagne d'un changement des potentiels électromagnétiques , tel qu'en l'Éq. (1.12). Le fait de pouvoir transformer une invariance globale en invariance locale grâce à la présence de potentiels scalaire et vecteur est à la base des *théories de jauge* qui décrivent les interactions forte (QCD), faible et électromagnétique .

Le couplage minimal est considéré comme la règle à observer pour obtenir la forme de l'interaction d'un système avec le champ électromagnétique , ce qui souligne l'importance fondamentale de l'invariance de jauge en électrodynamique. Cependant, pour qu'un système puisse être ainsi couplé au champ électromagnétique , il doit posséder une charge électrique, c'est-à-dire qu'il doit posséder une symétrie par rapport aux transformations de phase globales. Par exemple, le champ scalaire réel ne peut être couplé au champ électromagnétique , alors que le champ scalaire complexe, lui, peut y être couplé, comme dans le lagrangien suivant :

$$L = \int \mathrm{d}^3 r \ \left(|\mathcal{D}_t \varphi|^2 - v^2 |\boldsymbol{\mathcal{D}} \varphi|^2 - \mu^2 |\varphi|^2 \right) \tag{1.17}$$

Un exemple plus important est celui du champ de Schrödinger, c'est-à-dire de la matière deuxième-quantifiée, dont les interactions avec le champ électromagnétique sont représentées par le lagrangien suivant :

$$L = \int \mathrm{d}^3 r \ \left(i\hbar \psi^* \mathcal{D}_t \psi + \frac{\hbar^2}{2m} \psi^* \boldsymbol{\mathcal{D}}^2 \psi \right) \tag{1.18}$$

Dans cette dernière expression, ψ ne représente plus la fonction d'onde d'une particule, mais l'opérateur d'annihilation associé à un type de particule chargé. Ce n'est plus seulement l'équation de Schrödinger à une particule qui est invariante de jauge, c'est le lagrangien de la deuxième quantification. En principe, on peut ici utiliser la jauge de Coulomb et exprimer $\mathbf{A}$ en fonction des opérateurs de création et d'annihilation de photons. Nous aurions alors à notre disposition une expression pour l'hamiltonien d'interaction entre le champ électromagnétique et la matière en fonction des opérateurs de création et d'annihilation de photons et de particules matérielles.

1.3 Courant paramagnétique

Au lieu de traiter la matière dans le formalisme de la deuxième quantification, nous allons réserver ce traitement aux seuls photons dans ce qui suit. La partie matérielle du système sera décrite dans le formalisme habituel. Revenons à l'expression (1.8) pour l'hamiltonien d'une particule chargée dans un champ électromagnétique et écrivons-en la version quantique pour un ensemble de particules de même type ayant des impulsions $\mathbf{P}_i$ et des positions $\mathbf{R}_i$:

$$H = \sum_i \left\{ \frac{\mathbf{P}_i^2}{2m} - \frac{e}{2mc} (\mathbf{P}_i \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}_i) + \mathbf{A}(\mathbf{R}_i) \cdot \mathbf{P}_i) + \frac{e^2 \mathbf{A}(\mathbf{R}_i)^2}{2mc^2} + e\phi(\mathbf{R}_i) \right\} \tag{1.19}$$

Dans cette expression, les potentiels $\mathbf{A}$ et ϕ dépendent des opérateurs position $\mathbf{R}_i$ de chaque particule, de sorte qu'ils ne commutent pas avec les impulsions $\mathbf{P}_i$. Il serait alors peu pratique de remplacer les potentiels par leur version quantique. Pour remédier à cette difficulté on définit l'opérateur du *courant paramagnétique*

$$\boxed{\mathbf{J}(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{2m} \sum_i \{ \mathbf{P}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \mathbf{P}_i \}} \tag{1.20}$$

et l'opérateur de densité

$$\boxed{\rho(\mathbf{r}) \equiv \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)} \tag{1.21}$$

On peut alors écrire l'hamiltonien d'interaction comme suit :

$$H_{\text{int.}} = \int \mathrm{d}^3 r \, \left\{ -\frac{e}{c}\mathbf{J}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{2mc^2}\rho(\mathbf{r})\mathbf{A}(\mathbf{r})^2 + e\rho(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) \right\} \tag{1.22}$$

Dans cette expression les potentiels commutent avec les courants, parce qu'ils ne dépendent plus des opérateurs de position des particules. Après quantification, les potentiels deviennent des opérateurs qui agissent dans un espace des états décrivant le rayonnement électromagnétique , différent de celui décrivant la matière. L'espace des états complet est le produit tensoriel de ces deux espaces.

On peut séparer $H_{\text{int.}}$ en trois parties : $H_{\text{int.}} = H_1 + H_2 + H_3$:

$$\begin{aligned} H_1 &= -\frac{e}{c}\int \mathrm{d}^3 r \, \mathbf{J}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) \\ H_2 &= e^2 \int \mathrm{d}^3 r \, \frac{1}{2mc^2}\rho(\mathbf{r})\mathbf{A}(\mathbf{r})^2 \\ H_3 &= e \int \mathrm{d}^3 r \, \rho(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{1.23}$$

Comme auparavant, nous travaillerons dans la jauge de Coulomb. Dans cette jauge le potentiel scalaire ϕ est une fonction (et non une variable dynamique) fixée par la distribution de charge du système. Dans ce qui suit, nous supposerons que ϕ est le potentiel électrique produit par le noyau d'un atome ou encore le potentiel central effectif dans un atome à plusieurs électrons. De toute façon, nous l'inclurons dans l'hamiltonien non perturbé, en supposant que les solutions de ce dernier nous sont connues. L'interaction avec le champ électromagnétique quantifié se limite donc aux deux termes H_1 et H_2. En général, le premier est plus important que le second, en raison de la vitesse de la lumière au carré apparaissant dans H_2. Des précisions sur la différence entre H_1 et H_2 apparaîtront plus tard.

Rappelons le développement en fonctions propres du potentiel vecteur :

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{c}{\sqrt{V}} \sum_{i,\mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{\mathbf{k}}}} \left\{ a_{i,\mathbf{k}}\hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}}\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + a^\dagger_{i,\mathbf{k}}\hat{\mathbf{e}}^*_{i,\mathbf{k}}\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right\} \tag{1.24}$$

Nous avons placé le système dans un boîte de volume V, dans le but de faciliter le calcul de quantités telles que les taux de désintégration et les sections efficaces (cf. Éq. 3.14). En substituant ce développement dans l'hamiltonien H_1, on trouve[1]

$$H_1 = \frac{e}{\sqrt{V}} \sum_{i,\mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{\mathbf{k}}}} \left\{ a_{i,\mathbf{k}}\hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}} \cdot \mathbf{J}_{-\mathbf{k}} + a^\dagger_{i,\mathbf{k}}\hat{\mathbf{e}}^*_{i,\mathbf{k}} \cdot \mathbf{J}_{\mathbf{k}} \right\}$$

On suppose que la matière qui nous intéresse est composée d'électrons de charge $-e$ ($e > 0$), ce qui explique le changement de signe dans H_1. Nous avons introduit la transformée de Fourier du courant paramagnétique :

$$\mathbf{J}_{\mathbf{k}} = \int \mathrm{d}^3 r \, \mathbf{J}(\mathbf{r})\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{1.25}$$

[1] Il n'est pas utile pour le moment d'exprimer H_2 en fonction des opérateurs de création et d'anihilation.

2 Émission et absorption

2.1 Taux d'émission et d'absorption

Étudions le processus par lequel un atome émet ou absorbe un photon. Utilisons pour cela la règle d'or de Fermi au premier ordre dans la théorie des perturbations, avec l'hamiltonien d'interaction (1.24). Supposons que l'état initial comporte $n_{i,\mathbf{k}}$ photons dans le mode de propagation $(i, \mathbf{k})$ et que l'atome soit dans un état du spectre discret qu'on désignera par l'indice n. On note cet état initial du système total $|n; n_{i,\mathbf{k}}\rangle$. Après le processus, on supposera que l'atome est dans un état noté $|m\rangle$ et que le nombre de photons dans le même mode de propagation est $n_{i\mathbf{k}} \pm 1$. L'état final se note donc $|m; n_{i,\mathbf{k}} \pm 1\rangle$. Bien sûr, le signe $(+)$ correspond à l'émission d'un photon et le signe $(-)$ à l'absorption.

Selon la règle d'or, le taux de transition est donné par

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar}\Big|\langle m; n_{i,\mathbf{k}} \pm 1|H_1|n; n_{i,\mathbf{k}}\rangle\Big|^2 \delta(E_m - E_n \pm \hbar\omega) \tag{2.1}$$

où E_n et E_m sont les énergies des deux états atomiques et $\omega = c|\mathbf{k}|$ est la fréquence du photon émis ou absorbé.

Remarquons que les états de rayonnement peuvent aussi contenir un nombre indéterminé de photons dans d'autres modes, mais que nous nous intéressons à un processus dans lequel un seul photon est émis ou absorbé, de sorte que ces autres photons sont des spectateurs passifs qui n'ont pas d'influence sur l'amplitude du processus.

L'hamiltonien H_1 est une somme sur tous les modes, mais un seul de ces termes contribue à l'amplitude : celui associé au mode $(i, \mathbf{k})$. Ce terme est le produit d'un opérateur agissant sur les photons ($a_{i,\mathbf{k}}$ dans le cas de l'absorption) et d'un opérateur agissant sur l'atome ($\hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}} \cdot \mathbf{J}_{-\mathbf{k}}$ dans le même cas). L'élément de matrice de la partie électromagnétique est facile à évaluer :

$$\begin{aligned} \langle n_{i,\mathbf{k}} + 1|a^\dagger_{i,\mathbf{k}}|n_{i,\mathbf{k}}\rangle &= \sqrt{n_{i,\mathbf{k}} + 1} \\ \langle n_{i,\mathbf{k}} - 1|a_{i,\mathbf{k}}|n_{i,\mathbf{k}}\rangle &= \sqrt{n_{i,\mathbf{k}}} \end{aligned} \tag{2.2}$$

Il s'ensuit donc les amplitudes suivantes :

absorption :

$$\Gamma_{\text{abs.}} = \frac{(2\pi e)^2}{V\omega_{\mathbf{k}}} n_{i,\mathbf{k}} |\langle m|\mathbf{J}_{-\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}}|n\rangle|^2 \delta(E_m - E_n - \hbar\omega_{\mathbf{k}}) \tag{2.3}$$

émission :

$$\Gamma_{\text{ém.}} = \frac{(2\pi e)^2}{V\omega_{\mathbf{k}}} (n_{i,\mathbf{k}} + 1) |\langle m|\mathbf{J}_{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}^*_{i,\mathbf{k}}|n\rangle|^2 \delta(E_m - E_n + \hbar\omega_{\mathbf{k}}) \tag{2.4}$$

Le plus remarquable dans ces formules sont les facteurs de $n_{i,\mathbf{k}}$ et de $n_{i,\mathbf{k}} + 1$ qui proviennent de ce que le photon est un boson et qui sont responsables de l'émission et l'absorption *induites* de rayonnement : plus le nombre de photons dans l'état initial est grand, plus le processus d'émission ou d'absorption est probable. C'est le principe à la base du fonctionnement des lasers. À noter cependant que l'amplitude de la lumière incidente doit être grande *dans un mode donné*, c'est-à-dire que la lumière incidente doit être *cohérente* pour que cet effet ait lieu. Il est aussi remarquable que l'émission d'un photon puisse avoir lieu en l'absence de photon initial ($n_{i,\mathbf{k}} = 0$), c'est-à-dire en l'absence apparente de stimulation externe. Pour cette raison ce processus porte le nom d'*émission spontanée*. Il correspond au rayonnement classique d'une charge accélérée.

Dépendance angulaire de la puissance rayonnée
Calculons maintenant le taux de transition total d'un état atomique excité vers un état d'énergie plus basse (tel l'état fondamental) par émission spontanée. Il s'agit ici de faire la somme du taux (2.4) sur tous les photons d'énergie $\hbar\omega = E_n - E_m$. La somme sur les impulsions peut être convertie en une intégrale sur les fréquences comme suit :

$$\sum_{\mathbf{k}} \to V \int (\mathrm{d}^3 k) = V \int \frac{k^2 \mathrm{d}k \mathrm{d}\Omega}{(2\pi)^3} = V \int \frac{\omega^2 \mathrm{d}\omega \mathrm{d}\Omega}{(2\pi c)^3} \tag{2.5}$$

Cette intégrale sur les fréquences se fait à l'aide de la fonction delta en énergie. On trouve alors le taux de désintégration par unité d'angle solide, pour une polarisation donnée :

$$\frac{\mathrm{d}\Gamma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{e^2\omega}{2\pi\hbar c^3} |\langle m|\mathbf{J}_{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}^*_{i,\mathbf{k}}|n\rangle|^2 \tag{2.6}$$

Il s'agit ici du nombre de photons émis par unité de temps, par unité d'angle solide. On s'intéresse généralement à la puissance rayonnée par unité d'angle solide, qui s'obtient en multipliant par l'énergie $\hbar\omega$ du photon :

$$\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{e^2\omega^2}{2\pi c^3} |\langle m|\mathbf{J}_{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}^*_{i,\mathbf{k}}|n\rangle|^2 \tag{2.7}$$

Somme sur les polarisations
L'expression (2.7) nous donne la dépendance angulaire de la puissance rayonnée pour une polarisation bien précise du photon. En général, on ne s'intéresse pas à la polarisation du photon émis et on désire connaître la probabilité d'émission d'un photon de l'une ou l'autre polarisation. Il faut donc sommer sur les deux polarisations possibles. Cette somme se fait facilement grâce à la relation de fermeture des vecteurs de polarisation :

$$\sum_i e_{i,\mathbf{k},a} e^*_{i,\mathbf{k},b} = \delta_{ab} - \frac{k_a k_b}{k^2} \tag{2.8}$$

On calcule alors que

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}\Omega}_{\text{non pol.}} &= \frac{e^2\omega^2}{2\pi c^3} \langle m|J^a_{\mathbf{k}}|n\rangle\langle n|J^{b*}_{\mathbf{k}}|m\rangle \left(\delta_{ab} - \frac{k_a k_b}{k^2}\right) \\ &= \frac{e^2\omega^2}{2\pi c^3} \langle m|\mathbf{J}_{\perp\mathbf{k}}|n\rangle \cdot \langle m|\mathbf{J}_{\perp\mathbf{k}}|n\rangle^* \end{aligned} \tag{2.9}$$

où $\mathbf{J}_{\perp\mathbf{k}}$ est la projection de $\mathbf{J}_{\mathbf{k}}$ sur le plan perpendiculaire à $\mathbf{k}$ (la partie transverse du courant).

2.2 Rayonnement dipolaire électrique

Attardons-nous maintenant au calcul de l'élément de matrice :

$$\langle m|\mathbf{J}_{\mathbf{k}}|n\rangle = \int \mathrm{d}^3 r \; \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \langle m|\mathbf{J}(\mathbf{r})|n\rangle \tag{2.10}$$

L'élément de matrice $\langle m|\mathbf{J}(\mathbf{r})|n\rangle$ devient rapidement négligeable lorsque $|\mathbf{r}|$ est supérieur à un rayon atomique (les fonctions d'ondes atomiques décroissent exponentiellement). Les seules valeurs de $\mathbf{r}$

qui contribuent effectivement à l'intégrale sont telles que $\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} \ll 1$, puisque la longueur d'onde du photon émis ($\sim 10^{-7}$m) est beaucoup plus grande que la taille de l'atome ($\sim 10^{-10}$m).[1]

Nous allons utiliser l'approximation *dipolaire*, dans laquelle on néglige complètement le produit $\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}$: on remplace effectivement $\mathbf{J}_\mathbf{k}$ par $\mathbf{J}_0$. Mais

$$\begin{aligned}\mathbf{J}_0 &= \frac{1}{2m}\sum_i \int \mathrm{d}^3r\ (\mathbf{P}_i\delta(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i) + \delta(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)\mathbf{P}_i) \\ &= \frac{1}{m}\sum_i \mathbf{P}_i = \frac{\mathbf{P}}{m}\end{aligned} \tag{2.11}$$

où $\mathbf{P}$ est la somme des impulsions de tous les électrons de l'atome. Il s'agit dès lors de calculer l'élément de matrice $\langle m|\mathbf{P}|n\rangle$. Utilisons maintenant le fait que

$$\mathbf{P}_i = \frac{m}{i\hbar}[\mathbf{R}_i, H_0] \tag{2.12}$$

où H_0 est l'hamiltonien non perturbé de l'atome (seule l'énergie cinétique contribue à ce commutateur). Remarquons que le membre de droite de cette relation n'est rien d'autre que la vitesse $\dot{\mathbf{R}}_i$ de l'électron, en vertu de l'équation du mouvement de Heisenberg. Si on désigne par $\mathbf{R}$ la somme des positions des électrons ($\mathbf{R} = \sum_i \mathbf{R}_i$), on peut écrire

$$\frac{\mathbf{P}}{m} = \frac{1}{i\hbar}[\mathbf{R}, H_0] \tag{2.13}$$

et l'élément de matrice recherché est

$$\begin{aligned}\langle m|\mathbf{J}_0|n\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\langle m|[\mathbf{R}, H_0]|n\rangle \\ &= \frac{E_n - E_m}{i\hbar}\langle m|\mathbf{R}|n\rangle \\ &= \frac{\omega}{i}\langle m|\mathbf{R}|n\rangle\end{aligned} \tag{2.14}$$

Si on définit l'opérateur du dipôle électrique des électrons $\mathbf{d} \equiv -e\mathbf{R}$, la puissance rayonnée devient

$$\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{\omega^4}{2\pi c^3}|\langle m|\mathbf{d}\cdot\hat{\mathbf{e}}^*_{i,\mathbf{k}}|n\rangle|^2 \tag{2.15}$$

La somme sur les polarisations des photons peut s'effectuer comme indiqué plus haut, avec le résultat

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}\Omega}_{\text{non pol.}} = \frac{e^2\omega^4}{2\pi c^3}\langle m|\mathbf{R}_\perp|n\rangle\cdot\langle m|\mathbf{R}_\perp|n\rangle^*} \tag{2.16}$$

où $\mathbf{R}_\perp$ est la projection de $\mathbf{R}$ sur le plan perpendiculaire à $\mathbf{k}$.

[1] Ceci est dû au fait que l'énergie au repos mc^2 de l'électron est grande par rapport à son énergie cinétique (le rapport v/c d'un électron atomique est de l'ordre de la constante de structure fine $\alpha \sim 1/137$ et est une caractéristique de la force de l'interaction électromagnétique). Pour une énergie donnée, l'impulsion caractéristique d'un électron atomique est grande (et la distance caractéristique petite) en comparaison de celle d'un photon de même énergie.

2.3 Règles de sélection

Des considérations de symétrie font que toutes les transitions ne sont pas possibles au premier ordre dans la théorie des perturbations : il existe des *règles de sélection* qui régissent les éléments de matrice. Concentrons-nous sur le cas d'un atome émettant un photon, dans l'approximation dipolaire. Nous avons déjà rencontré la règle de sélection suivante :

$$\langle l', m'|\mathbf{R}|l, m\rangle = 0 \quad \text{si} \quad |l - l'| \neq 1 \tag{2.17}$$

où l et m sont les nombres quantiques orbital et magnétique (les autres nombre quantiques ne sont pas indiqués). Cette règle de sélection sur l se démontre en considérant l'identité suivante :

$$[\mathbf{L}^2, [\mathbf{L}^2, \mathbf{R}]] = 2\hbar^2(\mathbf{R}\mathbf{L}^2 + \mathbf{L}^2\mathbf{R}) \tag{2.18}$$

ainsi que le caractère polaire de $\mathbf{R}$ (voir la section 1.3).

D'autres règles de sélection proviennent du caractère vectoriel de $\mathbf{R}$, qui se manifeste par les relations de commutation suivantes avec le moment cinétique :

$$[L_a, R_b] = i\hbar\varepsilon_{abc}R_c \tag{2.19}$$

En particulier, on trouve

$$[L_z, Z] = 0 \qquad\qquad [L_z, X \pm iY] = \pm\hbar(X \pm iY) \tag{2.20}$$

L'élément de matrice de ces relations de commutation donne

$$\begin{aligned} \langle l', m'|Z|l, m\rangle &= 0 \quad \text{sauf si} \quad m = m' \qquad \text{et} \quad |l - l'| = 1 \\ \langle l', m'|(X \pm iY)|l, m\rangle &= 0 \quad \text{sauf si} \quad m' = m \pm 1 \quad \text{et} \quad |l - l'| = 1 \end{aligned} \tag{2.21}$$

Comme

$$\mathbf{R} = Z\hat{\mathbf{z}} + \frac{1}{2}(X + iY)(\hat{\mathbf{x}} - i\hat{\mathbf{y}}) + \frac{1}{2}(X - iY)(\hat{\mathbf{x}} + i\hat{\mathbf{y}}) \tag{2.22}$$

On conclut que

$$\langle l', m|\mathbf{R}|l, m\rangle \propto \hat{\mathbf{z}} \qquad\qquad \langle l', m \pm 1|\mathbf{R}|l, m\rangle \propto \hat{\mathbf{x}} \mp i\hat{\mathbf{y}} \tag{2.23}$$

Considérons maintenant une transition qui ne change pas le nombre magnétique ($m' = m$). D'après l'équation ci-haut et le résultat (2.16), la dépendance angulaire du rayonnement sera

$$\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}\Omega}_{\text{non pol.}} = \frac{e^2\omega^4}{2\pi c^3}|\langle l', m|Z|l, m\rangle|^2 \sin^2\theta \tag{2.24}$$

où θ est l'angle entre $\mathbf{k}$ et l'axe de quantification $\hat{\mathbf{z}}$. Au contraire, si la transition change la valeur de m ($m' = m \pm 1$), alors on trouve

$$\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}\Omega}_{\text{non pol.}} = \frac{e^2\omega^4}{2\pi c^3}|\langle l', m \pm 1|\frac{1}{2}(X \pm iY)|l, m\rangle|^2(1 + \cos^2\theta) \tag{2.25}$$

Si on observe une transition sans connaître la projection de spin de l'état initial et que l'hamiltonien est invariant par rotation (par exemple, en l'absence de champ magnétique ou électrique externe à l'atome) alors il faut sommer sur les états initiaux de même énergie, ce qui mène forcément à une puissance rayonnée non polarisée indépendante de la direction.

Considérons maintenant un photon émis par l'atome dans la direction $\hat{\mathbf{z}}$. Ce photon résulte obligatoirement d'une transition $m \to m' = m \pm 1$. En fonction des vecteurs de polarisation circulaire $\hat{\mathbf{e}}_\pm = (\hat{\mathbf{x}} \pm i\hat{\mathbf{y}})/\sqrt{2}$, on trouve

$$\langle l', m \pm 1|\mathbf{d} \cdot \hat{\mathbf{e}}^*_\pm|l, m\rangle = 0 \qquad\qquad \langle l', m \pm 1|\mathbf{d} \cdot \hat{\mathbf{e}}^*_\mp|l, m\rangle \neq 0 \tag{2.26}$$

Par exemple, si $m' = m + 1$, la valeur de J_z de l'atome augmente de un. Seul un photon de polarisation gauche ($\hat{\mathbf{e}}_-$) peut être émis, ce qui signifie que le moment cinétique du photon compense bel et bien celui gagné par l'atome : il y a conservation du moment cinétique total (atome plus champ électromagnétique).

2.4 Section d'absorption et règle de somme

On s'intéresse ici à l'absorption partielle d'un faisceau de lumière par un atome passant d'un niveau d'énergie à un autre, mais en restant dans le spectre discret. Pour un mode de propagation donné, ce taux est donné par la formule

$$\Gamma = \frac{(2\pi e)^2}{V\omega_{\mathbf{k}}} n_{i,\mathbf{k}} |\langle m|\mathbf{J}_{-\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}}|n\rangle|^2 \delta(E_m - E_n - \hbar\omega_{\mathbf{k}}) \tag{2.27}$$

On définit aussi une *section d'absorption*, donnée par le taux d'absorption pour une transition donnée, divisé par le flux de photons incidents. Ce flux est simplement obtenu en multipliant la densité de photons $n_{i,\mathbf{k}}/V$ par leur vitesse c. On obtient

$$\sigma_{\text{abs.}}^{n\to m} = \frac{(2\pi e)^2}{c\omega_{\mathbf{k}}} |\langle m|\mathbf{J}_{-\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}}|n\rangle|^2 \delta(E_m - E_n - \hbar\omega_{\mathbf{k}}) \tag{2.28}$$

Pour obtenir la section d'absorption totale de la lumière incidente sur un système préparé dans l'état $|n\rangle$, il faudrait sommer sur tous les états $|m\rangle$ possibles et intégrer sur les fréquences. Bien sûr, seuls les états ayant une énergie $E_m \sim E_n + \hbar\omega$ donneraient une contribution appréciable. En supposant que la lumière incidente est polarisée selon $\hat{\mathbf{x}}$ et en appliquant l'approximation dipolaire, le résultat est

$$\begin{aligned} \int \mathrm{d}\omega\ \sigma_{\text{tot.}} &= \frac{4\pi^2 e^2}{c\hbar} \sum_m \omega_{mn} |\langle m|X|n\rangle|^2 \\ &= \frac{2\pi^2 e^2}{mc} \sum_m f_{mn} \end{aligned} \tag{2.29}$$

où on a défini la *force d'oscillateur* f_{mn} comme

$$f_{mn} \equiv \frac{2m}{\hbar} \omega_{mn} |\langle m|X|n\rangle|^2 \tag{2.30}$$

Les coefficients f_{mn} jouissent de deux propriétés importantes : Ils sont positifs si $|n\rangle$ est l'état fondamental et ils satisfont à une règle de somme (dite de *Reiche-Thomas-Kuhn*):

$$\sum_m f_{mn} = \mathcal{Z} \quad \text{(nombre atomique)} \tag{2.31}$$

Cette règle de somme se démontre en calculant la valeur moyenne dans $|n\rangle$ de

$$[X, [X, H_0]] = -(\hbar^2/m)\mathcal{Z} \tag{2.32}$$

comme suit :

$$\begin{aligned} \langle n|[X, [X, H_0]]|n\rangle &= \langle n|(X[X, H_0] - [X, H_0]X)|n\rangle \\ &= \sum_m \Big\{ \langle n|X|m\rangle\langle m|[X, H_0]|n\rangle - \langle n|[X, H_0]|m\rangle\langle m|X|n\rangle \Big\} \\ &= -2\hbar \sum_m \omega_{mn} \langle n|X|m\rangle\langle m|X|n\rangle \\ &= -\frac{\hbar^2}{m} \sum_m f_{mn} \end{aligned} \tag{2.33}$$

Il s'ensuit que la section d'absorption totale est

$$\boxed{\int \mathrm{d}\omega\ \sigma_{\text{tot.}} = \frac{2\pi^2 \mathcal{Z} e^2}{mc}} \tag{2.34}$$

Ce résultat est remarquable en ce qu'il est indépendant des détails des états atomiques : il ne dépend que des constantes fondamentales de l'électron et de l'atome considéré. En fait, le même résultat peut être obtenu dans la théorie classique du rayonnement[2]

2.5 Effet photoélectrique

Si l'énergie des photons est suffisamment grande, l'électron qui en absorbe peut être arraché à l'atome (effet photoélectrique). Il faut dans ce cas distinguer trois régimes d'énergie :

a) Si l'énergie cinétique de l'électron expulsé est comparable à son énergie potentielle par rapport à l'ion, alors il faut tenir compte de cette attraction en travaillant avec le spectre continu associé au potentiel ionique, par la méthode des déphasages, par exemple.

b) Si l'énergie cinétique de l'électron est grande par rapport à l'énergie potentielle, mais encore petite par rapport à l'énergie au repos $m_e c^2$, on peut supposer que l'état final de l'électron est une onde plane et procéder à un calcul non relativiste simple.

c) Si l'énergie de l'électron est comparable à son énergie de repos, un traitement relativiste est nécessaire.

On peut tout de suite prédire que l'importance de l'effet photoélectrique diminue avec l'énergie, car l'absorption d'un photon par un électron libre est impossible pour des raisons cinématiques : ce processus ne pourrait conserver à la fois la quantité de mouvement et l'impulsion; la présence de l'ion est nécessaire à cet effet. Comme l'électron se compare de plus en plus à une particule libre quand son énergie augmente en comparaison de son énergie de liaison dans l'atome, on comprend pourquoi la section efficace de l'effet photoélectrique devrait diminuer avec l'énergie.

Effet photoélectrique de l'atome d'hydrogène

Procédons à un calcul précis dans le cas de l'atome d'hydrogène, dans le régime intermédiaire (b) décrit ci-dessus. L'état final de l'électron est une onde plane de vecteur d'onde $\mathbf{p}$, alors que l'état initial est l'état fondamental $|0\rangle$ de l'atome d'hydrogène. L'élément de matrice qui nous intéresse est

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{p}|\mathbf{J}_{-\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}}|0\rangle &= \frac{1}{2m}\int \mathrm{d}^3r\ \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\langle \mathbf{p}|\Big\{\mathbf{P}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{R}) + \delta(\mathbf{r}-\mathbf{R})\mathbf{P}\Big\}|0\rangle \cdot \hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}} \\
&= \frac{1}{m}\int \mathrm{d}^3r\ \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\langle \mathbf{p}|\Big\{\mathbf{P}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{R}) - i\frac{1}{2}\hbar\nabla_{\mathbf{r}}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{R})\Big\}|0\rangle \cdot \hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}} \\
&= \frac{\hbar}{m\sqrt{V}}\int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r'\ \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}'}\Big\{\mathbf{p}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - i\frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{r}}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\Big\} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}}\ \psi_0(\mathbf{r}')
\end{aligned} \tag{2.35}$$

Dans la 2e équation nous avons commuté $\mathbf{P}$ avec la fonction delta. Le facteur de $1/\sqrt{V}$ provient de la normalisation de l'onde plane et ψ_0 est la fonction d'onde de l'état fondamental :

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\mathrm{e}^{-r/a_0} \qquad r = |\mathbf{r}|,\ a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \tag{2.36}$$

[2] Voir JACKSON, 2e éd., p. 805.

Le deuxième terme ne contribue pas à l'amplitude, car une intégration par parties produit un facteur de $\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}}$, qui s'annule. Le premier terme devient ensuite

$$\frac{\hbar}{m\sqrt{V}}\mathbf{p}\cdot\hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}}\ \tilde{\psi}_0(\mathbf{p}-\mathbf{k}) \tag{2.37}$$

où $\tilde{\psi}_0$ est la transformée de Fourier de la fonction d'onde de l'état fondamental. On calcule que

$$\tilde{\psi}_0(\mathbf{q}) = \frac{8\sqrt{\pi}a_0^{3/2}}{[1+(qa_0)^2]^2}$$

Le taux de transition est alors ($\mathbf{q}=\mathbf{p}-\mathbf{k}$)

$$\Gamma_{\mathbf{k}\to\mathbf{p}} = \frac{(2\pi e)^2}{V\omega_{\mathbf{k}}}n_{i,\mathbf{k}}\left\{\frac{\hbar^2}{m^2V}|\mathbf{p}\cdot\hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}}|^2\frac{64\pi a_0^3}{[1+(qa_0)^2]^4}\right\}\delta(E_{\mathbf{p}}-\hbar\omega_{\mathbf{k}}) \tag{2.38}$$

Pour calculer la section différentielle, on doit sommer sur les états électroniques situés dans un intervalle $\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}E_{\mathbf{p}}$, en utilisant la méthode habituelle :

$$\sum_{\mathbf{p}} \to V\int(\mathrm{d}^3p) = \frac{mV}{(2\pi)^3\hbar^2}\int \mathrm{d}\Omega\mathrm{d}E|\mathbf{p}| \tag{2.39}$$

Cela mène au résultat suivant, après division par le flux incident de photons, égal à $cn_{i,\mathbf{k}}/V$:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{32e^2}{mc\omega_{\mathbf{k}}}\frac{|\mathbf{p}||\mathbf{p}\cdot\hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}}|^2a_0^3}{[1+(qa_0)^2]^4} \qquad (\mathbf{q}=\mathbf{p}-\mathbf{k}) \tag{2.40}$$

Si le faisceau de photons incidents n'est pas polarisé, il faut calculer la moyenne sur les polarisations initiales, ce qui se fait exactement de la même façon que la somme sur les polarisations finales dans le cas de l'émission, sauf qu'on divise par deux. L'expression $|\mathbf{p}\cdot\hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}}|^2$ est alors remplacée par $\frac{1}{2}(\mathbf{p}_\perp)^2 = \frac{1}{2}p^2\sin^2\theta$, où θ est l'angle entre le faisceau incident et la direction de $\mathbf{p}$. Donc

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}_{\text{non pol.}} = \frac{16e^2}{mc\omega_{\mathbf{k}}}\frac{(pa_0)^3}{[1+(qa_0)^2]^4}\sin^2\theta \tag{2.41}$$

Rappelons que cette expression n'est valable que dans le régime $E_0 \ll \hbar\omega \ll mc^2$. En fonction des nombres d'onde k du photon et p de l'électron, la conservation de l'énergie s'écrit

$$\hbar ck = \frac{\hbar^2p^2}{2m} \quad \text{ou} \quad k\lambda_c = \frac{K}{mc^2} \quad \text{et} \quad p\lambda_c = \left(\frac{2K}{mc^2}\right)^{1/2} \tag{2.42}$$

où $\lambda_c \equiv \hbar/mc$ est la longueur d'onde de Compton de l'électron. On constate que, dans le régime non relativiste,

$$\frac{k}{p} = \left(\frac{K}{2mc^2}\right)^{1/2} \ll 1 \tag{2.43}$$

Par conséquent, on peut négliger k devant p et $(\mathbf{k}-\mathbf{p})^2 \approx p^2$. D'autre part, comme $\lambda_c = \alpha a_0$, on a

$$pa_0 = (\hbar\omega)^{1/2}(2m/\hbar^2)^{1/2}a_0 = (\hbar\omega)^{1/2}\left(\frac{2a_0}{e^2}\right)^{1/2} = \left(\frac{\hbar\omega}{E_0}\right)^{1/2} \gg 1 \tag{2.44}$$

($E_0 = e^2/2a_0$ est l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène). Donc la section différentielle ci-haut se réduit à

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}_{\text{non pol.}} &= \frac{16e^2}{mc\omega_{\mathbf{k}}}(pa_0)^{-5}\sin^2\theta \\ &= 32\alpha a_0^2\left(\frac{\hbar\omega}{E_0}\right)^{-7/2}\sin^2\theta\end{aligned}} \tag{2.45}$$

On constate que la section efficace diminue rapidement en fonction de l'énergie $\hbar\omega$.

3 Diffusion de la lumière

3.1 Généralités

Lors des processus de diffusion de la lumière par un atome, le nombre de photons demeure constant. Il est bien évident que l'hamiltonien d'interaction H_1 ne peut pas contribuer au premier ordre dans la théorie des perturbations; un calcul au deuxième ordre sera nécessaire. Cependant, l'hamiltonien H_2 contribuera au premier ordre. Il faut en général tenir compte des deux termes de $H_{\text{int.}}$.

On doit aussi considérer plusieurs régimes d'énergie dans lequels se déroulent des processus ayant des noms et des implications différentes :

a) Pour des fréquences plus petites que la séparation des niveaux d'énergie ($\hbar\omega < E_m - E_n$) l'atome ne peut pas être excité. L'atome ressemble alors à un électron lié harmoniquement au noyau et on a affaire à la diffusion Rayleigh.

b) Si $\hbar\omega > E_m - E_n$, le photon peut diffuser en laissant l'atome dans un état différent. L'énergie du photon est alors modifiée. Il s'agit de la diffusion Raman.

c) Si $E_m - E_n \ll \hbar\omega \ll mc^2$, l'électron paraît libre aux yeux du photon, quoique profitant de l'inertie de l'atome. C'est le régime de la diffusion Thomson. La fréquence du photon ne change pas de façon appréciable. C'est en particulier le cas d'un photon qui ne change pas l'état de l'atome en diffusant ($E_m = E_n$).

d) Si $\hbar\omega > mc^2$, le processus porte le nom de diffusion Compton. Il s'agit d'un régime relativiste et la fréquence du photon change de façon appréciable.

Supposons que l'état initial comporte $n_{i,\mathbf{k}}$ photons dans le mode $(i,\mathbf{k})$ et aucun dans le mode $(i',\mathbf{k}')$, alors que l'état final en comporte un dans ce dernier mode et $n_{i,\mathbf{k}} - 1$ dans le premier. On s'intéresse à l'élément de matrice de H_2 au premier ordre :

$$\frac{e^2}{2mc^2}\int \mathrm{d}^3r\ \langle m|\rho(\mathbf{r})|n\rangle\langle n_{i,\mathbf{k}}-1, 1_{i',\mathbf{k}'}|\mathbf{A}(\mathbf{r})^2|n_{i,\mathbf{k}}, 0_{i',\mathbf{k}'}\rangle \tag{3.1}$$

Le développement en modes de $\mathbf{A}(\mathbf{r})^2$ est

$$\mathbf{A}(\mathbf{r})^2 = \frac{2\pi c^2\hbar}{V}\sum_{j,\mathbf{q};j',\mathbf{q}'}\frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}}\omega_{\mathbf{q}'}}}\left\{a_{j,\mathbf{q}}\hat{\mathbf{e}}_{j,\mathbf{q}}\mathrm{e}^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + \text{c.h.}\right\}\cdot\left\{a_{j',\mathbf{q}'}\hat{\mathbf{e}}_{j',\mathbf{q}'}\mathrm{e}^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}} + \text{c.h.}\right\} \tag{3.2}$$

De ce développement, deux termes contribuent à l'élément de matrice : $(j, \mathbf{q}) = (i, \mathbf{k})$ et $(j', \mathbf{q}') = (i', \mathbf{k}')$ d'une part et $(j, \mathbf{q}) = (i', \mathbf{k}')$ et $(j', \mathbf{q}') = (i, \mathbf{k})$ d'autre part. Le résultat est la somme de ces deux contributions :

$$\langle f|H_2|i\rangle = \frac{2e^2\pi\hbar}{m\sqrt{\omega\omega'}}\sqrt{n_{i,\mathbf{k}}}\;\hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{e}}^*_{i',\mathbf{k}'}\frac{1}{V}\langle m|\rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}|n\rangle \tag{3.3}$$

où bien sûr $\rho_{\mathbf{q}}$ est la transformée de Fourier de l'opérateur $\rho(\mathbf{r})$.

Dans l'approximation dipolaire pour des états atomiques, on peut remplacer $\rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}$ par $\rho_{\mathbf{q}=0}$. Cette dernière quantité n'est rien d'autre que l'opérateur du nombre de particules, qui commute naturellement avec l'hamiltonien. Son élément de matrice dans le nuage électronique est donc $\langle m|\rho_0|n\rangle = \mathcal{Z}\langle m|n\rangle$, où $\mathcal{Z}$ est le nombre d'électrons.

3.2 Diffusion Thomson

Si on suppose que seul H_2 contribue appréciablement au processus,[1] la règle d'or donne alors le taux de transition suivant :

$$\Gamma^{n\to m}_{i,\mathbf{k}\to i',\mathbf{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{2\pi\hbar e^2}{m}\right)^2\frac{n_{i,\mathbf{k}}}{\omega\omega'}|\hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{e}}^*_{i',\mathbf{k}'}|^2\frac{1}{V^2}\Big|\langle m|\rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}|n\rangle\Big|^2\delta\left(E_m - E_n + \hbar\omega' - \hbar\omega\right) \tag{3.4}$$

On procède ensuite à la somme habituelle sur les vecteurs d'ondes et à la division par le flux de photons incidents pour trouver la section différentielle suivante :

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = r_0^2\frac{\omega'}{\omega}|\hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{e}}^*_{i',\mathbf{k}'}|^2\Big|\langle m|\rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}|n\rangle\Big|^2 \tag{3.5}$$

où $r_0 = e^2/mc^2$ est le rayon classique de l'électron.

Examinons d'abord le cas de la diffusion de la lumière sur des électrons libres. Les états électroniques sont alors des ondes planes et on doit calculer l'élément de matrice suivant, car l'approximation dipolaire n'est pas valable :

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{p}'|\rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}|\mathbf{p}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{V}}\int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r'\;\mathrm{e}^{i\mathbf{r}\cdot(\mathbf{k}-\mathbf{k}')}\mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}'}\langle\mathbf{p}'|\rho(\mathbf{r})|\mathbf{r}'\rangle\\ &= \frac{1}{V}\int \mathrm{d}^3r\;\mathrm{e}^{i\mathbf{r}\cdot(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{p}-\mathbf{p}')}\\ &= \delta_{\mathbf{p}+\mathbf{k}-\mathbf{p}'-\mathbf{k}'}\end{aligned} \tag{3.6}$$

La section efficace est alors

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = r_0^2\frac{\omega'}{\omega}|\hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{e}}^*_{i',\mathbf{k}'}|^2 \tag{3.7}$$

C'est la section efficace de Thomson. La conservation de l'impulsion et de l'énergie sont implicites :

$$\mathbf{p} + \mathbf{k} = \mathbf{p}' + \mathbf{k}' \tag{3.8}$$

$$\hbar\omega + \frac{\hbar^2\mathbf{p}^2}{2m} = \hbar\omega' + \frac{\hbar^2\mathbf{p}'^2}{2m} \tag{3.9}$$

[1] On montre que pour la diffusion Thomson la contribution au deuxième ordre de H_1 est plus petite par un facteur de v/c, où v est la vitesse typique des électrons.

Maintenant, supposons que la lumière soit diffusée par un atome à $\mathcal{Z}$ électrons sans que les degrés de liberté internes de l'atome soient excités (diffusion élastique). On peut alors considérer que le photon est diffusé par le nuage électronique en son entier, ce dernier agissant de manière cohérente, sans que sa structure interne n'intervienne. L'amplitude de diffusion coïncide alors avec celle calculée plus haut, sauf qu'elle est sommée sur tous les électrons, résultant en un facteur $\mathcal{Z}$ supplémentaire. On néglige la contribution du noyau à l'amplitude de diffusion, étant donné que la masse de ce dernier est énorme en comparaison de celle de l'électron et que son rayon classique est d'autant plus minuscule. Cependant, le nuage électronique profite alors de l'inertie du noyau et l'impulsion apparaissant dans le delta de Kronecker est l'impulsion totale de l'atome. Si $\mathbf{p} = 0$ initialement, alors

$$\frac{\hbar^2|\mathbf{p}'|^2}{2M} = \hbar(\omega - \omega') \qquad \mathbf{p}' = \mathbf{k} - \mathbf{k}' \tag{3.10}$$

La masse M de l'atome étant grande par rapport au transfert d'impulsion, on peut sans peine supposer que $\omega = \omega'$. La section efficace de diffusion est alors

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \mathcal{Z}^2 r_0^2 |\hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}^*_{i',\mathbf{k}'}|^2 \tag{3.11}$$

L'important ici est le facteur de $\mathcal{Z}^2$, qui provient d'une superposition *cohérente* des amplitudes de diffusion. Si la somme des effets des différents électrons était incohérente, ce sont les sections efficaces qui seraient additionnées et non les amplitudes, ce qui ne donnerait qu'un facteur $\mathcal{Z}$ et non $\mathcal{Z}^2$.

Ceci explique que les nuages soient visibles, alors que la vapeur d'eau ne l'est pas. En effet, les nuages sont composés de goutelettes microscopiques, comportant un grand nombre de molécules rassemblées dans un espace plus petit que la longueur d'onde de la lumière incidente. Toutes ces molécules agissent alors de manière cohérente. La vapeur d'eau, elle, est à l'état gazeux et le nombre de molécules dans l'espace d'une longueur d'onde est beaucoup plus petit. Beaucoup moins d'électrons peuvent alors participer à la diffusion cohérente, faisant de la vapeur d'eau un milieu quasi transparent. Bien sûr, la diffusion Thomson ne s'applique pas à des petites fréquences comme celles invoquées ici, mais l'argument de cohérence est le même pour la diffusion Rayleigh (voir plus bas).

Effectuons maintenant la somme sur les polarisations finales et la moyenne sur les polarisations initiales :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2}\sum_{i,j} |\hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}^*_{j,\mathbf{k}'}|^2 &= \frac{1}{2}\sum_{i,j} e_{i,\mathbf{k},a} e^*_{i,\mathbf{k},b} e^*_{j,\mathbf{k}',a} e_{j,\mathbf{k}',b} \\
&= \frac{1}{2}\left(\delta_{ab} - \frac{k_a k_b}{k^2}\right)\left(\delta_{ab} - \frac{k'_a k'_b}{k'^2}\right) \\
&= \frac{1}{2}\left(1 + (\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}')^2\right) \\
&= \frac{1}{2}\left(1 + \cos^2\theta\right)
\end{aligned} \tag{3.12}$$

où θ est l'angle de diffusion. La section différentielle non polarisée est donc

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}_{\text{non pol.}} = \frac{1}{2}\mathcal{Z}^2 r_0^2 (1 + \cos^2\theta)} \tag{3.13}$$

L'intégrale sur les angles donne la section totale :

$$\sigma_{\text{Thom.}} = \frac{8\pi}{3}\mathcal{Z}^2 r_0^2 \tag{3.14}$$

3.3 Diffusion Raman

Lors des processus de diffusion Raman, les degrés de liberté internes de l'atome sont excités, de sorte que l'atome est dans un état différent après la collision. Il faut tenir compte des contributions de H_2 au premier ordre et de H_1 au deuxième ordre. Nous avons déjà calculé la contribution de H_2 dans l'approximation dipolaire :

$$\langle f|H_2|i\rangle = \frac{2e^2\pi\hbar}{m\sqrt{\omega\omega'}}\sqrt{n_{i,\mathbf{k}}}\;\hat{\mathbf{e}}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^{*}\frac{\mathcal{Z}}{V}\langle m|n\rangle \tag{3.15}$$

On désigne par $\hat{\mathbf{e}}$ et $\hat{\mathbf{e}}'$ les polarisations initiale et finale. Calculons maintenant celle de H_1.

L'amplitude de diffusion au deuxième ordre est (cf. Eq.(2.39))

$$\sum_k \frac{\langle f|H_1|k\rangle\langle k|H_1|i\rangle}{E_i - E_k + i\eta} \tag{3.16}$$

Dans le cas qui nous occupe, il y a deux états intermédiaires possibles pour le champ électromagnétique (voir figure): le premier ne comporte aucun photon, alors que le deuxième en comporte deux, les mêmes que dans les états final et initial. Il y a bien sûr une multitude d'états intermédiaires possibles pour l'atome.

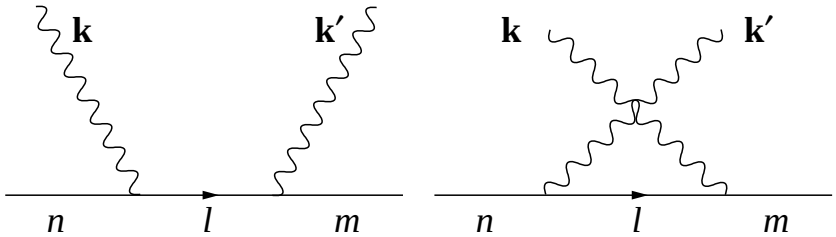


Figure 3.1. Les deux états intermédiaires possibles dans la diffusion Raman, en langage diagrammatique.

La contribution du premier état intermédiaire est la suivante (on somme ici sur les états atomiques):

$$\sum_l \frac{\langle m|\mathbf{J}_{\mathbf{k}'}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^{*}|l\rangle\langle l|\mathbf{J}_{-\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{e}}|n\rangle}{E_n - E_l + \hbar\omega + i\eta}\frac{2\pi\hbar e^2}{V\sqrt{\omega\omega'}}\sqrt{n_{i,\mathbf{k}}} \tag{3.17}$$

alors que la contibution du second état intermédiaire est

$$\sum_l \frac{\langle m|\mathbf{J}_{-\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{e}}|l\rangle\langle l|\mathbf{J}_{\mathbf{k}'}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^{*}|n\rangle}{E_n - E_l - \hbar\omega' + i\eta}\frac{2\pi\hbar e^2}{V\sqrt{\omega\omega'}}\sqrt{n_{i,\mathbf{k}}} \tag{3.18}$$

La conservation de l'énergie nous permet de remplacer le dénominateur de cette dernière expression par $E_m - E_l - \hbar\omega + i\eta$.

Dans l'approximation dipolaire, on procède au remplacement suivant :

$$\langle m|\mathbf{J}_{\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{e}}|l\rangle \to \frac{1}{m}\langle m|\mathbf{P}\cdot\hat{\mathbf{e}}|l\rangle = \frac{E_l - E_m}{i\hbar}\langle m|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}|l\rangle \tag{3.19}$$

L'amplitude totale peut donc être écrite comme

$$\frac{2\pi e^2}{imV\sqrt{\omega\omega'}}\sqrt{n_{i,\mathbf{k}}}\sum_l\left\{\frac{\langle m|\mathbf{P}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^*|l\rangle\langle l|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}|n\rangle(E_n-E_l)}{E_n-E_l+\hbar\omega+i\eta}\right.$$
$$\left.+\frac{\langle m|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}|l\rangle\langle l|\mathbf{P}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^*|n\rangle(E_l-E_m)}{E_m-E_l-\hbar\omega+i\eta}\right\} \tag{3.20}$$

En additionnant et soustrayant $\hbar\omega$ au numérateur, la quantité entre accolades devient

$$\left\{\langle m|\mathbf{P}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^*|l\rangle\langle l|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}|n\rangle-\langle m|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}|l\rangle\langle l|\mathbf{P}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^*|n\rangle\right\}$$
$$-\hbar\omega\left\{\frac{\langle m|\mathbf{P}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^*|l\rangle\langle l|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}|n\rangle}{E_m-E_l+\hbar\omega'+i\eta}+\frac{\langle m|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}|l\rangle\langle l|\mathbf{P}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^*|n\rangle}{E_n-E_l-\hbar\omega'+i\eta}\right\} \tag{3.21}$$

Encore une fois, procédons à la substitution $\mathbf{P}=(m/i\hbar)[\mathbf{R},H_0]$. En répétant la procédure précédente, mais cette fois avec $\hbar\omega'$, on obtient

$$\left\{\langle m|\mathbf{P}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^*|l\rangle\langle l|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}|n\rangle-\langle m|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}|l\rangle\langle l|\mathbf{P}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^*|n\rangle\right\}$$
$$-im\omega\left\{\langle m|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^*|l\rangle\langle l|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}|n\rangle-\langle m|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}|l\rangle\langle l|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^*|n\rangle\right\} \tag{3.22}$$
$$+i\hbar m\omega\omega'\left\{\frac{\langle m|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^*|l\rangle\langle l|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}|n\rangle}{E_m-E_l+\hbar\omega'+i\eta}+\frac{\langle m|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}|l\rangle\langle l|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^*|n\rangle}{E_n-E_l-\hbar\omega'+i\eta}\right\}$$

Cette gymnastique nous permet de sommer sur les états intermédiaires pour les deux premières lignes, en utilisant la relation de complétude. La première ligne donne

$$\langle m|[\mathbf{P}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^*,\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}]|n\rangle=-i\hbar\hat{\mathbf{e}}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^*\mathcal{Z}\langle m|n\rangle \tag{3.23}$$

alors que la deuxième ligne s'annule. On vérifie que la première ligne donne une contribution qui compense exactement l'amplitude due à H_2 au premier ordre. On peut donc écrire l'amplitude nette suivante :

$$2\pi\hbar e^2\sqrt{\omega\omega' n_{i,\mathbf{k}}}\;\frac{1}{V}\sum_l\left\{\frac{\langle m|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^*|l\rangle\langle l|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}|n\rangle}{E_n-E_l+\hbar\omega+i\eta}+\frac{\langle m|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}|l\rangle\langle l|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^*|n\rangle}{E_n-E_l-\hbar\omega'+i\eta}\right\} \tag{3.24}$$

La section différentielle se calcule de la manière habituelle, en insérant dans la règle d'or et en sommant sur les impulsions comprises dans un élément $\mathrm{d}\omega\mathrm{d}\Omega$. On obtient

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{e^4\omega\omega'^3}{\hbar^2c^4}\left|\sum_l\left\{\frac{\langle m|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^*|l\rangle\langle l|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}|n\rangle}{\omega_{nl}+\omega+i\eta}+\frac{\langle m|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}|l\rangle\langle l|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^*|n\rangle}{\omega_{nl}-\omega'+i\eta}\right\}\right|^2} \tag{3.25}$$

où $\omega_{ln}\equiv(E_l-E_n)/\hbar$.

Notons que le préfacteur de cette section efficace est α^2, où $\alpha=(e^2/\hbar c)$ est la constante de structure fine. Cette constante sans dimension joue le rôle du paramètre perturbatif dans l'électrodynamique quantique. Ici, un processus du deuxième ordre donne lieu à un facteur α^2.

La puissance de α est égale à l'ordre du processus considéré. La petitesse de α ($\sim 1/137$) assure que la théorie des perturbations fonctionne très bien en électrodynamique.

Examinons d'abord la limite des faibles fréquences. Dans ce cas l'atome doit rester dans le même état, disons, l'état fondamental : $|n\rangle = |m\rangle = |0\rangle$. La fréquence du photon est alors inchangée : $\omega = \omega'$. En négligeant $\hbar\omega$ au dénominateur, on obtient

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{e\omega}{c}\right)^4 \left| \sum_l \left\{ \frac{\langle 0|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^*|l\rangle\langle l|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}|0\rangle + \langle 0|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}|l\rangle\langle l|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^*|0\rangle}{E_0 - E_l + i\eta} \right\} \right|^2 \tag{3.26}$$

Il s'agit de la section efficace de Rayleigh, avec sa dépendance caractéristique en ω^4, responsable entre autres de la couleur bleue du ciel.

Section efficace

Calculons maintenant la section de diffusion totale non polarisée. Considérons d'abord l'expression suivante :

$$\sum_l \frac{\langle 0|R_a|l\rangle\langle l|R_b|0\rangle}{E_0 - E_l + i\eta}$$

En raison de l'isotropie de l'atome, ce tenseur doit être strictement proportionnel à δ_{ab}. En fonction des coefficients f_{mn} définis en (2.30), on peut écrire

$$\sum_l \frac{\langle 0|R_a|l\rangle\langle l|R_b|0\rangle}{E_0 - E_l + i\eta} = -\frac{1}{2m}\delta_{ab}\sum_l \frac{f_{l0}}{\omega_{l0}^2} \tag{3.27}$$

Il s'ensuit que la section différentielle est

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \left[\sum_l \frac{\omega^2}{\omega_{l0}^2} f_{l0}\right]^2 |\hat{\mathbf{e}}'^*\cdot\hat{\mathbf{e}}|^2 \tag{3.28}$$

La somme sur les polarisations finales et la moyenne sur les polarisations initiales donne

$$\frac{1}{2}\sum_{i,j} |\hat{\mathbf{e}}_i\cdot\hat{\mathbf{e}}_j^*|^2 = \frac{1}{2}(1+\cos^2\theta) \tag{3.29}$$

où θ est l'angle entre $\mathbf{k}$ et $\mathbf{k}'$. L'intégrale sur tous les angles solides donne

$$\int \mathrm{d}\Omega\ \frac{1}{2}(1+\cos^2\theta) = \frac{8\pi}{3} \tag{3.30}$$

La section efficace totale non polarisée est donc

$$\sigma_{\text{tot.}} = \frac{8\pi}{3} r_0^2 \left[\sum_l \frac{\omega^2}{\omega_{l0}^2} f_{l0}\right]^2 \tag{3.31}$$

Le préfacteur qui multiplie l'expression entre crochets n'est autre que la section de diffusion Thomson (3.11). Si on compare cette expression à l'expression correspondante obtenue par un calcul classique (modèle de Drude), on constate qu'il s'agit d'une somme sur différents oscillateurs, de fréquences ω_{l0} et d'abondances relatives f_{l0}. La positivité de f_{l0} et la règle de somme $\sum_l f_{l0} = \mathcal{Z}$ sont importantes dans cette interprétation.

Diffusion Raman et parité
La diffusion Raman permet d'avoir accès à des transitions atomiques qui seraient faibles en absorption en raison de la conservation de la parité. En effet, les deux états atomiques figurant dans un processus d'absorption dans l'approximation dipolaire doivent être de parités opposées. Dans le cas de la diffusion Raman, les états intermédiaires doivent avoir des parités opposées à celles de $|n\rangle$ et de $|m\rangle$ pour que leur contribution à l'amplitude soit non nulle, ce qui implique que les états initial et final ont la même parité. Par exemple, la transition d'absorption $1s \to 2p$ est forte, mais la transition Raman correspondante est très faible (au-delà de l'approximation dipolaire) alors que le contraire est vrai pour la transition $1s \to 2s$.

3.4 Résonances

Les expressions ci-haut pour les amplitudes de transition au deuxième ordre sont adéquates en autant qu'elles sont petites, car ce sont des résultats perturbatifs. Elles deviennent évidemment invalides lorsque $E_n - E_l + \hbar\omega = 0$ pour un certain état $|l\rangle$, c'est-à-dire quand le photon a une énergie tout juste suffisante pour effectuer la transition $|n\rangle \to |l\rangle$. Dans ce cas, on dit qu'il y a *résonance*.

En réalité, le dénominateur ne s'annule pas vraiment, car tout état excité est instable, avec un taux de désintégration Γ_l et une demi-vie $\tau = 1/\Gamma_l$. La dépendance temporelle de l'état est alors

$$|l\rangle \to |l\rangle \ \exp -i(E_l/\hbar - i\Gamma_l/2)t \tag{3.32}$$

Pour tenir compte du fait que $|l\rangle$ n'est pas exactement un état stationnaire, on peut remplacer E_l par $E_l - i\frac{1}{2}\hbar\Gamma_l$ dans les dénominateurs. Le terme $i\eta$ n'est alors plus requis, puisque généré naturellement.

Tout proche d'une résonance, on peut ne conserver que le terme résonant dans l'amplitude de diffusion Raman (les autres termes sont souvent négligeables en comparaison) et on obtient la section résonante suivante :

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_{\text{rés.}}} = \frac{e^4\omega\omega'^3}{\hbar^2c^4}\frac{|\langle m|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}'^*|l\rangle|^2|\langle l|\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{e}}|n\rangle|^2}{(\omega-\omega_{ln})^2+\frac{1}{4}\Gamma_l^2} \tag{3.33}$$

En fonction de ω, la section a un comportement de type Lorentzien (ou Breit-Wigner). Le taux de désintégration Γ_l est la largeur de la raie à mi-hauteur. En variant ω, on pourrait observer les résonances en succession, jusqu'à ce que Γ_l devienne trop grand et que le pic se perde dans l'amplitude générale.

Il est remarquable que la section différentielle résonante peut être écrite comme le produit de la section d'absorption de $|n\rangle$ vers $|l\rangle$ par le taux de désintégration de l'état $|l\rangle$ vers l'état $|m\rangle$:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_{\text{rés.}}} = \sigma_{\text{abs.}}^{n\to l}\,\frac{\mathrm{d}\Gamma}{\mathrm{d}\Omega}^{l\to m}_{\text{ém.}}\,\frac{1}{\Gamma_l} \tag{3.34}$$

La question se pose alors à savoir si on peut considérer la diffusion Raman résonante comme la succession de deux processus indépendants : une absorption suivie d'une émission dans un état différent. Cette interprétation est légitime si la demi-vie de l'état excité est beaucoup plus grande que le temps d'irradiation, c'est-à-dire si $\Gamma \ll \Delta\omega$, où $\Delta\omega$ est l'incertitude sur la fréquence du photon incident. Si cette condition n'est pas remplie, on ne peut pas considérer que l'état excité ait une vie propre, indépendante de l'excitation lumineuse. En d'autres mots, d'autres états sont excités et participent à l'amplitude, qui doit alors est considérée comme résultant d'un processus simple, c'est-à-dire cohérent.

Problème 3.1 *Interaction photon-électron*

Écrivez l'hamiltonien d'interaction du champ électromagnétique avec un ensemble de fermions libres sans spin, de masse m. On désire une expression impliquant les opérateurs de création et d'annihilation $c^\dagger(\mathbf{k})$ et $c(\mathbf{k})$ des électrons et $a^\dagger(i,\mathbf{k})$ et $a(i,\mathbf{k})$ du champ, dans la jauge de Coulomb. Votre point de départ devrait être le lagrangien (1.18).

Problème 3.2 *Diffusion de Thomson au 2e ordre*

L'hamiltonien d'interaction entre la lumière et la matière non-relativiste se compose de deux termes : H_1 et H_2 (voir notes). Nous avons calculé l'*amplitude* de diffusion d'un photon par un électron libre dont l'énergie cinétique K est beaucoup plus petite que celle du photon ($\hbar\omega$) au premier ordre dans la théorie des perturbations en H_2. Calculez la contribution à cette amplitude provenant de H_1 au deuxième ordre, et montrez qu'elle est beaucoup plus petite que la première, si $K \ll \hbar\omega$.

Problème 3.3 *Diffusion de la lumière par un neutron*

Décrivez comment procéder au calcul de la diffusion de la lumière par un neutron. Éléments à considérer : hamiltonien d'interaction, états initial et final du neutron et du champ électromagnétique , ordre de la théorie des perturbations à utiliser, états intermédiaires possibles, etc. N'allez en aucun cas au-delà d'un calcul de l'amplitude de diffusion.

Problème 3.4 *Émission spontanée*

Calculez le taux de désintégration et la demi-vie de l'état $2p$ de l'atome d'hydrogène par émission spontanée d'un photon. Une valeur numérique est demandée : $\Gamma = 6,25.10^8$ Hz.

Problème 3.5 *Rayonnement de freinage*

On sait qu'un électron libre ne peut émettre spontanément un photon car le processus ne conserve pas à la fois l'énergie et l'impulsion. Cependant, le processus devient possible si un ion se trouve à proximité pour fournir l'impulsion manquante. Dans ce problème, on considère un électron diffusé par un potentiel $V(\mathbf{r})$. On sait comment calculer la section différentielle de diffusion au premier ordre dans la théorie des perturbations. Le problème est maintenant d'inclure dans le processus l'émission par l'électron d'un photon. Ce processus est appelé *rayonnement de freinage* (ou *Bremsstrahlung* en allemand et en anglais) car il ne peut se produire que si l'électron est freiné (ou accéléré) par le potentiel diffuseur V.

Prenons comme état initial un électron de vecteur d'onde $\mathbf{p}$ et le vide du champ électromagnétique : $|i\rangle = |\mathbf{p};0\rangle$. Comme état final, on prend un électron de vecteur d'onde $\mathbf{p}'$ et un photon de polarisation $\hat{\mathbf{e}}$ et de vecteur d'onde $\mathbf{k}$: $|f\rangle = |\mathbf{p}';(\mathbf{k},\hat{\mathbf{e}})\rangle$. Nous nous restreignons au cas non relativiste.

a) Montrez que le processus est impossible au premier ordre de la théorie des perturbations.

b) Montrez qu'au deuxième ordre, seuls deux états intermédiaires contribuent,

$$|\mathbf{p}'+\mathbf{k};0\rangle \quad \text{et} \quad |\mathbf{p}-\mathbf{k};(\mathbf{k},\hat{\mathbf{e}})\rangle$$

comprenant respectivement zero et un photon.

c) La quantité d'intérêt ici est la section différentielle de diffusion $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\Omega'\mathrm{d}\omega$, c'est-à-dire la probabilité d'observer l'électron diffusé dans un élément d'angle solide $\mathrm{d}\Omega$ et le photon émis dans un élément d'angle solide $\mathrm{d}\Omega'$ et dans l'intervalle de fréquence $\mathrm{d}\omega$, divisée par le flux d'électrons incident. Cette section différentielle est moyennée sur les polarisations du photon. Montrez que

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\Omega'\mathrm{d}\omega} = \frac{1}{(2\pi)^4\hbar^3}\frac{|\mathbf{p}'|}{\omega|\mathbf{p}|}\frac{e^2}{c^3}|\tilde{V}(\mathbf{q})|^2\mathbf{q}^2\sin^2\gamma$$

où $\mathbf{q} = \mathbf{p}' - \mathbf{p}$ est le transfert d'impulsion de l'électron, γ est l'angle entre $\mathbf{q}$ et $\mathbf{k}$ et $\tilde{V}$ est la transformée de Fourier de $V(\mathbf{r})$. Notez que, dans l'approximation non relativiste, le vecteur d'onde du photon est négligeable en comparaison de $\mathbf{p}$ et $\mathbf{p}'$.

Problème 3.6 *Émission de photons par un oscillateur*

On considère ici un oscillateur harmonique de charge e, ne pouvant se mouvoir que dans la direction $\hat{\mathbf{z}}$. L'hamiltonien non perturbé de cet oscillateur est $H_0 = \hbar\Omega b^\dagger b$, où Ω est la fréquence de l'oscillateur et $b, b^\dagger$ sont les opérateurs d'échelle associés.

a) Montrez que l'hamiltonien d'interaction avec le champ électromagnétique est

$$H_1 = -ie\hbar\sqrt{\frac{\pi\Omega}{mV}}(b - b^\dagger)\sum_{i,\mathbf{k}}\frac{1}{\sqrt{\omega_\mathbf{k}}}\left\{a_{i,\mathbf{k}}\hat{\mathbf{e}}_{i,\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{z}} + \text{c.h.}\right\}$$

b) Montrez que la demi-vie inverse Γ_n de l'état $|n\rangle$ de l'oscillateur est

$$\Gamma_n = \frac{2e^2\Omega^2}{3mc^3}n$$

Problème 3.7 *Diffusion de la lumière par un oscillateur*

Un oscillateur harmonique tri-dimensionnel est caractérisé par l'hamiltonien suivant :

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0\mathbf{X}^2$$

et la particule en oscillation possède une charge e, en couplage minimal avec le champ électromagnétique. Les états propres de l'oscillateur spatial sont caractérisés par trois entiers non négatifs (n_x, n_y, n_z) et l'énergie associée est $E = \hbar\omega_0(n_x+n_y+n_z)$. On s'intéresse ici à la diffusion d'un photon de fréquence ω par ce système.

a) On désire appliquer l'approximation dipolaire à ce problème. *En fonction des paramètres de l'hamiltonien* (m, ω_0, c, etc.), quel est le petit paramètre qui rend cette approximation valable? Indice : trouver une expression pour la longueur caractéristique ℓ_0 de l'oscillateur.

b) Supposons que l'oscillateur soit dans son état fondamental avant et après le processus de diffusion (diffusion Rayleigh). Calculez la section différentielle de diffusion non polarisée. Indice : les relations de la section 3.3 sont applicables. Vous devez identifier les états intermédiaires possibles et calculer tous les éléments de matrice requis.

c) Considérons maintenant la diffusion Raman : l'état initial de l'oscillateur est son état fondamental, mais pas l'état final. Identifiez précisément les états finals possibles et les états intermédiaires intervenant dans la relation (3.25).

Problème 3.8 *Rayonnement quadrupolaire et dipolaire magnétique*

Considérez un atome ne pouvant émettre un rayonnement dipolaire électrique entre les deux états $|m\rangle$ et $|n\rangle$, en raison des règles de sélection.

a) Montrez que l'élément de matrice $\langle m|\mathbf{J}_\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{e}}^*_{i,\mathbf{k}}|n\rangle$ peut être exprimé comme suit lorsqu'on développe $\exp -i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}$ au premier ordre en série de Taylor :

$$\langle m|\mathbf{J}_\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{e}}^*_{i,\mathbf{k}}|n\rangle = \frac{i}{2m}\langle m|\mathbf{L}|n\rangle\cdot(\hat{\mathbf{e}}^*_{i,\mathbf{k}}\wedge\mathbf{k}) - \frac{1}{6}\omega_{nm}\langle m|Q_{ab}|n\rangle k_b e^*_{i,\mathbf{k},a}$$

où $\mathbf{L}$ est le moment cinétique orbital total de l'atome et Q_{ab} est le tenseur quadrupolaire total de l'atome, défini comme

$$Q_{ab} = \sum_i\left\{3R_{i,a}R_{i,b} - \mathbf{R}^2\delta_{ab}\right\}$$

Notez que $\hat{\mathbf{e}}^*_{i,\mathbf{k}}\wedge\mathbf{k}$ est dans la direction du champ magnétique de l'onde associée au photon et que le premier terme implique donc le couplage Zeeman orbital entre les électrons et le champ magnétique du photon.

Indice : utilisez la relation

$$[R_{i,a}R_{i,b}, H_0] = \frac{i\hbar}{m}(R_{i,a}P_{i,b} + P_{i,a}R_{i,b})$$

et la définition du moment cinétique orbital total :

$$\mathbf{L} = \frac{1}{2}\sum_i (\mathbf{R}_i \wedge \mathbf{P}_i - \mathbf{P}_i \wedge \mathbf{R}_i)$$

b) Montrez que l'élément de matrice dipolaire magnétique typique est α fois plus petit que l'élément de matrice dipolaire électrique (α est la constante de structure fine), alors que pour le terme quadrupolaire ce rapport typique est ka_0, où $a_0 = \hbar^2/me^2$ est le rayon de Bohr. Si une transition dipolaire électrique est interdite par conservation de la parité, qu'en sera-t-il des transitions dipolaire magnétique et quadrupolaire?

Problème 3.9 *Interaction phonon-photon*

Le paragraphe qui suit constitue un rappel sur les phonons en trois dimensions dans les cristaux ayant plus d'un atome par maille élémentaire. Considérons un réseau Γ dont la maille élémentaire comporte r ions. Soit $\mathbf{u}_{\mathbf{m},i}$ le déplacement du i^e ion ($i = 1, 2, \ldots, r$) associé au site $\mathbf{m}$ du réseau. La position d'équilibre de l'ion i dans la maille $\mathbf{m}$ est $\mathbf{m} + \mathbf{r}_i$. L'hamiltonien décrivant les oscillations harmoniques de ces ions est le suivant :

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{m},i} M_i \dot{\mathbf{u}}^2_{\mathbf{m},i} + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{m},i,a}\sum_{\mathbf{n},j,b} \Phi_{ia,jb}(\mathbf{m}-\mathbf{n}) u_{\mathbf{m}ia} u_{\mathbf{n}jb}$$

où les indices a, b désignent les composantes des vecteurs, M_i est la masse de la i^e espèce d'ion dans chaque maille et $\Phi_{ia,jb}(\mathbf{m}-\mathbf{n})$ est le potentiel interionique, fonction de la différence des sites, des types d'ions et des composantes spatiales des déplacements. Cet hamiltonien se diagonalise exactement comme tous les autres hamiltoniens quadratiques que nous avons rencontrés, sauf que le nombre d'indices est plus grand! On peut finalement écrire le déplacement en fonction d'opérateurs de création et d'annihilation comme suit :

$$\mathbf{u}_{\mathbf{m},i} = \frac{1}{\sqrt{M_i}}\sqrt{V_\Gamma}\sum_s \int_{\text{Z.B.}} (\mathrm{d}^3 k)\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_s(\mathbf{k})}}\left\{ b_s(\mathbf{k})\boldsymbol{\varepsilon}^s_i(\mathbf{k})\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{m}} + \text{ c.h. } \right\}$$

Ici s est un indice de mode, qui va de 1 à $3r$, résultant de la diagonalisation de l'hamiltonien dans sa partie 'ia' de ses indices. Le vecteur $\boldsymbol{\varepsilon}^s_i(\mathbf{k})$ est un vecteur de polarisation, qui n'entretient en général pas de relation d'orthogonalité particulière avec $\mathbf{k}$, sauf en certains points de la zone de Brillouin. Les opérateurs $b_s(\mathbf{k})$ obéissent aux relations de commutation habituelles :

$$[b_s(\mathbf{k}), b^\dagger_{s'}(\mathbf{q})] = \delta_{\Gamma^*}(\mathbf{k}-\mathbf{q})\delta_{ss'}$$

a) En supposant qu'un ion de type i porte une charge effective q_i, écrivez l'hamiltonien d'interaction phonon-photon en fonction des opérateurs de création et d'annihilation ($b_s(\mathbf{k})$ pour les phonons et $a_j(\mathbf{q})$ pour les photons) en faisant l'approximation que le potentiel vecteur est évalué à la position d'équilibre de chaque ion et non à sa position instantanée. À quels types de processus cet hamiltonien d'interaction mène-t-il? Est-ce possible de diagonaliser cet hamiltonien (dans l'approximation citée) et, si oui, comment procéderiez-vous?

b) Supposons qu'on essaie de raffiner cet hamiltonien d'interaction en évaluant le potentiel vecteur à la position instantanée de chaque ion, mais en ne conservant que la correction au premier ordre en $\mathbf{u}_{\mathbf{m},i}$. Quels nouveaux types de processus phonon-photon seraient alors possibles? Justifiez.

CHAPITRE 8

Théorie relativiste de l'électron

L'étude des phénomènes impliquant des électrons ayant une énergie comparable ou supérieure à leur énergie de masse mc^2 nécessite une théorie de deuxième quantification compatible avec l'invariance relativiste. Qu'entend-on par invariance relativiste? Dans le contexte de la première quantification, ceci signifie que l'équation d'onde devrait avoir la même forme dans tous les référentiels inertiels, ce qui n'est manifestement pas le cas de l'équation de Schrödinger. Comme l'équation d'onde joue le rôle de l'équation du mouvement classique en deuxième quantification, la condition d'invariance relativiste signifie que l'action S – dont les équations du mouvement sont tirées – devrait être la même dans tous les référentiels inertiels.

La stratégie qui sera adoptée dans ce chapitre est la suivante. Après quelques rappels sur la notation covariante et les transformations de Lorentz, on discutera de la façon dont un champ peut se transformer lorsqu'on passe d'un référentiel à un autre. Ceci permettra de classifier les champs selon leurs règles de transformation, c.-à-d. selon les représentations du groupe de Lorentz. Ensuite, se concentrant sur une représentation particulière (la représentation de Dirac) on construira une action invariante pour des particules relativistes libres. L'interprétation physique en fonction d'électrons et de positrons sera ensuite expliquée.

1 Groupe de Lorentz

1.1 Rappels

Nous utiliserons pour décrire l'espace-temps les coordonnées contravariantes $x^\mu = (ct, x, y, z)$ où $\mu = 0, 1, 2, 3$. L'intervalle invariant s^2 est spécifié par le tenseur métrique :

$$s^2 = g_{\mu\nu} x^\mu x^\nu \qquad\qquad g_{\mu\nu} = \mathrm{diag}[1, -1, -1, -1] \tag{1.1}$$

La convention de sommation est appliquée sur les paires d'indices covariant et contravariant identiques.

Lors du passage d'un référentiel inertiel à un autre avec une vitesse relative $\mathbf{v}$, le changement de coordonnées associé est obtenu par une transformation de Lorentz :

$$x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu \tag{1.2}$$

où $\Lambda^\mu{}_\nu$ est une matrice dépendant de la vitesse $\mathbf{v}$. La condition d'invariance de l'intervalle s'écrit

$$g_{\mu\nu} x'^\mu x'^\nu = g_{\mu\nu} x^\mu x^\nu \quad \Longrightarrow \quad \Lambda^\mu{}_\alpha g_{\mu\nu} \Lambda^\nu{}_\beta = g_{\alpha\beta} \tag{1.3}$$

En notation matricielle, cette dernière équation s'écrit

$$\Lambda^t \mathsf{g} \Lambda = \mathsf{g} \tag{1.4}$$

où g est la matrice formée par les composantes du tenseur métrique. L'ensemble des matrices Λ satisfaisant à cette condition forment un groupe qu'on appelle le *groupe de Lorentz*.

Notons que l'opérateur de gradient $\partial_\mu = \partial/\partial x^\mu$ se transforme ainsi lors d'un changement de référentiel :

$$\partial'_\mu = \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu}\partial_\nu = (\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu \partial_\nu \tag{1.5}$$

Une quantité A_μ se comportant comme ∂_μ lors d'une transformation de Lorentz est qualifiée de *quadri-vecteur covariant*, alors qu'une quantité B^μ se comportant comme x^μ est qualifiée de *quadri-vecteur contravariant*. Naturellement, La contraction d'un indice contravariant avec un indice covariant produit une quantité invariante :

$$A'_\mu B'^\mu = (\Lambda^{-1})^\alpha{}_\mu \Lambda^\mu{}_\beta A_\alpha B^\beta = \delta^\alpha{}_\beta A_\alpha B^\beta = A_\mu B^\mu \tag{1.6}$$

Un indice contravariant peut devenir covariant à l'aide du tenseur métrique $g_{\mu\nu}$ et, inversement, un indice covariant peut devenir contravariant à l'aide du tenseur métrique inverse $g^{\mu\nu} = \mathrm{diag}[1, -1, -1, -1]$:

$$A_\mu = g_{\mu\nu} A^\nu \qquad A^\mu = g^{\mu\nu} A_\nu \qquad (g^{\mu\alpha} g_{\alpha\nu} = \delta^\mu{}_\nu) \tag{1.7}$$

D'après la condition (1.4), le déterminant $\det \Lambda$ est égal à ± 1. Une transformation telle que $\det \Lambda = -1$ implique une inversion du temps ou une transformation de parité et ne peut être obtenue par une déformation continue de la transformation identité. De même, une transformation telle que $\Lambda^0{}_0 < 0$ implique une inversion du temps et ne peut non plus être obtenue de façon continue à partir de l'identité. Donc le groupe de Lorentz n'est pas connexe, mais comporte plusieurs composantes. La composante reliée à l'identité renferme les transformations dites *orthochrones* ($\Lambda^0{}_0 > 0$) et *propres* ($\det \Lambda = 1$). C'est à ce sous-groupe que nous nous intéresserons.

Rappelons la forme de la transformation de Lorentz pour un changement de référentiel (sans rotation) avec une vitesse relative $v\hat{\mathbf{x}}$:

$$\begin{aligned} x'^0 &= x^0 \cosh\eta - x^1 \sinh\eta \qquad & x'^2 &= x^2 \\ x'^1 &= x^1 \cosh\eta - x^0 \sinh\eta \qquad & x'^3 &= x^3 \end{aligned} \tag{1.8}$$

où le paramètre η est la *rapidité* associée à la vitesse v:

$$\frac{v}{c} = \tanh\eta \tag{1.9}$$

La rapidité a ceci de particulier qu'elle est additive lorsqu'on applique deux transformations de Lorentz en succession dans la même direction : si η_1 est la rapidité entre deux référentiels S et S' et si η_2 est la rapidité entre S' et S'', alors la rapidité de S'' par rapport à S sera $\eta_1 + \eta_2$. Cette propriété n'est pas vraie pour les vitesses.

1.2 Algèbre de Lorentz

Représentations du groupe de Lorentz
Nous nous intéressons ici à une théorie impliquant un champ générique Φ (possédant un certain nombre de composantes). Lors d'une transformation de Lorentz $x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}{}_{\nu} x^{\nu}$, ce champ se transforme comme suit (voir la sous-section 4.1):

$$\Phi'(x') = \mathcal{F}(\Phi(x)) = L_{\Lambda}\Phi(x) \tag{1.10}$$

où L_{Λ} est une matrice opérant sur les composantes de Φ. Cette matrice dépend bien sûr de la transformation particulière Λ qui a été effectuée; plus précisément, l'ensemble des matrices L_{Λ} forment une représentation du groupe de Lorentz, dans le sens que

$$L_{\Lambda_1\Lambda_2} = L_{\Lambda_1} L_{\Lambda_2} \tag{1.11}$$

Notre tâche est ici d'identifier les représentations possibles – et, de ce fait, le nombre de composantes de Φ – dans le but de construire une théorie de particules relativistes.

Bien entendu, on connait la représentation la plus simple : celle d'un champ scalaire ϕ qui n'est pas affecté par la transformation de Lorentz :

$$\phi(x') = \phi(x) \tag{1.12}$$

La 'matrice' L_{Λ} est alors de dimension un et égale à l'unité. Le lagrangien invariant pour le champ scalaire s'écrit ainsi :[1]

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\partial_{\mu}\phi\partial^{\mu}\phi = \frac{1}{2}\left\{\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)^2 - (\nabla\phi)^2\right\} \tag{1.13}$$

(la vitesse de la lumière est ici égale à un). Ce qui nous intéresse cependant sont les représentations non triviales, décrivant des particules avec spin : comme le groupe des rotations est un sous-groupe du groupe de Lorentz, une particule de spin $\frac{1}{2}$ comme l'électron nécessite une représentation L_{Λ} non triviale.

Transformations infinitésimales
Nous allons maintenant procéder à une analyse du groupe de Lorentz analogue à celle que nous avons faite du groupe de rotation Considérons les transformations infinitésimales $\Lambda^{\mu}{}_{\nu} = \delta^{\mu}{}_{\nu} + \varepsilon^{\mu}{}_{\nu}$, où $\varepsilon^{\mu}{}_{\nu}$ est une quantité infinitésimale dont nous négligerons les puissances supérieures à 1. La condition (1.4) appliquée aux transformations infinitésimales devient $\varepsilon_{\alpha\beta} + \varepsilon_{\beta\alpha} = 0$. En d'autre termes, les $\varepsilon_{\alpha\beta}$ forment une matrice infinitésimale antisymétrique comportant de ce fait six paramètres indépendants. Le groupe de Lorentz est donc paramétrisé par six variables, dont trois pour décrire les rotations et trois pour les transformations de Lorentz proprement dites (trois directions pour la vitesse relative).

Retournons maintenant à la définition générale (4.11) des transformations infinitésimales et la définition (4.14) des générateurs associés. La variation de la coordonnée x^{μ} par rapport au paramètre $\varepsilon_{\rho\nu}$ de la transformation infinitésimale peut s'écrire

$$\frac{\delta x^{\mu}}{\delta\varepsilon_{\rho\nu}} = \frac{1}{2}(g^{\rho\mu}x^{\nu} - g^{\nu\mu}x^{\rho}) \tag{1.14}$$

[1] Notez que l'invariance de l'action est équivalente à celle de la densité lagrangienne $\mathcal{L}$, puisque la mesure d'intégration $\mathrm{d}^3 r dt$ est un invariant.

La matrice de transformation L_Λ prend la forme suivante pour une transformation infinitésimale :

$$L_\Lambda \approx 1 - \frac{1}{2} i\varepsilon_{\rho\nu} S^{\rho\nu} \tag{1.15}$$

où $S^{\rho\nu}$ est le générateur de la transformation des champs. Si on appelle $L^{\rho\nu}$ le générateur total associé à ces transformations, la définition (4.14) mène à l'expression suivante :

$$\frac{1}{2} i\varepsilon_{\rho\nu} L^{\rho\nu}\Phi = \frac{1}{2}\varepsilon_{\rho\nu}(x^\nu\partial^\rho - x^\rho\partial^\nu)\Phi + \frac{1}{2} i\varepsilon_{\rho\nu} S^{\rho\nu}\Phi \tag{1.16}$$

Le facteur de $\frac{1}{2}$ compense le double comptage des paramètres de transformation causé par la contraction des indices dans $\varepsilon_{\rho\nu} L^{\rho\nu}$. Les générateurs sont donc

$$\begin{aligned} L^{\rho\nu} &= i(x^\rho\partial^\nu - x^\nu\partial^\rho) + S^{\rho\nu} \\ &= M^{\rho\nu} + S^{\rho\nu} \end{aligned} \tag{1.17}$$

Le premier terme ($M^{\rho\nu}$) est la partie orbitale du générateur, alors que le deuxième terme est la partie intrinsèque, ou *spin*. Cette terminologie est tout à fait analogue à celle employée dans le cas du moment cinétique, tout simplement parce que le moment cinétique est un sous-ensemble des générateurs du groupe de Lorentz. En fait, les générateurs L_{12}, L_{23} et L_{31} ne sont autres que les générateurs du moment cinétique en dimension 3.

Les générateurs de spins $S^{\rho\nu}$ commutent avec la partie orbitale. L'algèbre du groupe de Lorentz est obtenue en calculant les relations de commutation des générateurs $L_{\mu\nu}$. En oubliant pour le moment la partie intrinsèque, c.-à-d. en supposant $L_{\mu\nu} = M_{\mu\nu}$, on trouve

$$[L_{\mu\nu}, L_{\rho\sigma}] = i(g_{\nu\rho}L_{\mu\sigma} - g_{\mu\rho}L_{\nu\sigma} - g_{\nu\sigma}L_{\mu\rho} + g_{\mu\sigma}L_{\nu\rho}) \tag{1.18}$$

Cette algèbre est adéquate pour toutes les dimensions spatiales d dans lesquelles on choisit de définir une métrique $g_{\mu\nu} = \mathrm{diag}[1, -1, \cdots, -1]$. La même algèbre doit être obtenue pour la partie intrinsèque $S_{\mu\nu}$ séparément, sinon ces opérateurs ne pourraient représenter le groupe de Lorentz. Le problème est en fait de déterminer quelles sont les matrices $S_{\mu\nu}$ possibles qui obéissent à ces relations de commutation.

Pour identifier les représentations du groupe de Lorentz possibles en dimension $3+1$, on définit les combinaisons linéaires suivantes :

$$J_i = \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}L_{jk} \qquad\qquad K_i = L_{0i} \tag{1.19}$$

(les indices latins vont de 1 à 3) ou encore

$$L_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & K_1 & K_2 & K_3 \\ -K_1 & 0 & J_3 & -J_2 \\ -K_2 & -J_3 & 0 & J_1 \\ -K_3 & J_2 & -J_1 & 0 \end{pmatrix} \tag{1.20}$$

On obtient pour ces combinaisons les relations de commutation suivantes :

$$\begin{aligned} [K_i, K_j] &= -i\varepsilon_{ijk}J_k \\ [J_i, J_j] &= i\varepsilon_{ijk}J_k \\ [J_i, K_j] &= i\varepsilon_{ijk}K_k \end{aligned} \tag{1.21}$$

On reconnait dans la deuxième équation les relations de commutation des composantes du moment cinétique. Les générateurs correpondants du groupe de Lorentz sont associés aux rotations dans l'espace, sans changement de référentiel. Pour découpler les relations ci-haut, on définit les générateurs $N_i = \frac{1}{2}(J_i + iK_i)$ et $\bar{N}_i = \frac{1}{2}(J_i - iK_i)$, en fonction desquels l'algèbre du groupe de Lorentz devient simplement

$$\begin{aligned} [N_i, N_j] &= i\varepsilon_{ijk} N_k \\ [\bar{N}_i, \bar{N}_j] &= i\varepsilon_{ijk} \bar{N}_k \\ [N_i, \bar{N}_j] &= 0 \end{aligned} \tag{1.22}$$

Nous reconnaissons l'algèbre du groupe $su(2)$ s'appliquant aux générateurs N_i et $\bar{N}_i$ séparément. Conformément à ce que nous savons sur le moment cinétique, les opérateurs $N^2 = N_i N_i$ et $N^{+2} = \bar{N}_i \bar{N}_i$ commutent avec les générateurs des transformations de Lorentz. La valeur de ces opérateurs nous permet d'identifier les représentations irréductibles du groupe de Lorentz. Pour chaque copie de $su(2)$ une représentation irréductible est spécifiée par un entier ou demi-entier j. Nous pouvons donc identifier une représentation irréductible du groupe de Lorentz par un doublet (j_1, j_2).

Revenons maintenant à la transformation infinitésimale (1.15):

$$L_\Lambda = 1 - \frac{1}{2} i\varepsilon_{\alpha\beta} S^{\alpha\beta} \tag{1.23}$$

En définissant les paramètre de rotation et de changement de repère

$$\omega^k = \frac{1}{2}\varepsilon^{krs}\varepsilon_{rs} \qquad\qquad \eta^k = \varepsilon_{0k} \tag{1.24}$$

on peut écrire L_Λ comme

$$\begin{aligned} L_\Lambda &= 1 - i\left(\boldsymbol{\omega}\cdot\mathbf{J} + \boldsymbol{\eta}\cdot\mathbf{K}\right) \\ &= 1 - i\left\{(\boldsymbol{\omega} - i\boldsymbol{\eta})\cdot\mathbf{N} + (\boldsymbol{\omega} + i\boldsymbol{\eta})\cdot\bar{\mathbf{N}}\right\} \end{aligned} \tag{1.25}$$

où $\mathbf{N}$ est le vecteur dont les composantes sont N_k (idem pour $\bar{\mathbf{N}}$). les trois composantes de $\boldsymbol{\omega}$ sont les angles de rotation et les trois composantes de $\boldsymbol{\eta}$ sont reliées à la vitesse de transformation $\mathbf{v}$. Comme $\mathbf{N}$ commute avec $\bar{\mathbf{N}}$, on peut facilement passer aux transformations finies en prenant l'exponentielle séparément pour les deux termes de l'accolade :

$$\boxed{L_\Lambda = \exp -i\left[(\boldsymbol{\omega} - i\boldsymbol{\eta})\cdot\mathbf{N}\right]\ \exp -i\left[(\boldsymbol{\omega} + i\boldsymbol{\eta})\cdot\bar{\mathbf{N}}\right]} \tag{1.26}$$

Le point important ici est que les générateurs $\mathbf{N}$ et $\bar{\mathbf{N}}$ n'ont pas besoin d'appartenir à la même représentation de $su(2)$. On peut donc considérer des champs qui ont une expression non triviale de $\mathbf{N}$, tandis que $\bar{\mathbf{N}}$ est nul, ou vice-versa. On constate que le paramètre $\boldsymbol{\eta}$ est la rapidité associée au changement de repère, puisqu'il est manifestement additif lorsqu'on multiplie deux matrices L_{Λ_1} et L_{Λ_2}.

La représentation la plus simple est la représentation triviale $(0, 0)$, dont le module est de dimension 1, auquel appartient le champ scalaire ϕ. Les représentations non triviales les plus simples sont $(\frac{1}{2}, 0)$ et $(0, \frac{1}{2})$, chacune de dimension 2. Ces représentations sont utiles dans la description des neutrinos. Plus spécifiquement, un neutrino sera décrit par un champ de fermions à deux composantes $\psi_L = (\psi_1, \psi_2)$. Lors d'une transformation de Lorentz le champ de neutrino se transformera comme suit :

$$\psi_L(x) \to \psi'_L(x') = L_L \psi_L(x) \tag{1.27}$$

où la matrice L_L est d'ordre 2 et appartient à la représentation $(\frac{1}{2},0)$ (d'où l'indice L, pour *levrogyre*). Nous connaissons la forme des matrices de rotation pour $j=\frac{1}{2}$:

$$L_L = \exp -i\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{\omega}-i\boldsymbol{\eta}) \tag{1.28}$$

Les matrices de rotations, résultant de l'exponentiation de J_i, sont obtenues en posant $\boldsymbol{\eta}=0$: on reconnait leur forme habituelle. Les matrices de changement de repère, résultant de l'exponentiation de K_i, sont obtenues en posant $\boldsymbol{\omega}=0$.[2] Pour un champ ψ_D appartenant à la représentation $(0,\frac{1}{2})$, la matrice de transformation est plutôt

$$L_D = \exp -i\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{\omega}+i\boldsymbol{\eta}) \tag{1.29}$$

Le conjugué hermitique de L_L appartient à la représentation $(0,\frac{1}{2})$: $L_L^\dagger = L_D^{-1}$.

Les représentations $(\frac{1}{2},0)$ et $(0,\frac{1}{2})$ sont irréductibles au sens du groupe de Lorentz local (la partie connexe). Cependant, elles ne le sont pas pour le groupe de Lorentz global, dans lequel on a inclus les transformations de parité et d'inversion du temps. La parité change la direction de la vitesse et donc transforme L_L en L_D. Autrement dit, l'opération de parité échange les deux représentations. Une représentation irréductible au sens global peut être obtenue en prenant la somme directe $(\frac{1}{2},0)\oplus(0,\frac{1}{2})$: il s'agit de la *représentation de Dirac*, que nous allons maintenant étudier, mais d'un point de vue un peu plus général.

2 Équation de Dirac

2.1 Algèbre de Clifford

Supposons qu'il existe $d+1$ matrices γ^μ $(\mu=0,1,\ldots,d)$ obéissant aux relations d'anticommutation

$$\boxed{\gamma^\mu\gamma^\nu+\gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}} \tag{2.1}$$

Alors on démontre facilement que la quantité

$$\boxed{S^{\mu\nu} = \frac{1}{4}i(\gamma^\mu\gamma^\nu-\gamma^\nu\gamma^\mu) = \frac{1}{4}i[\gamma^\mu,\gamma^\nu]} \tag{2.2}$$

satisfait à l'algèbre de Lorentz (1.18). La relation (2.1) porte le nom d'*algèbre de Clifford* et les matrices γ^μ sont les *matrices de Dirac*. La démonstration se fait comme suit. Premièrement, on utilise la relation (2.1) pour écrire

$$S^{\mu\nu} = \frac{1}{2}i(\gamma^\mu\gamma^\nu-g^{\mu\nu}) \tag{2.3}$$

Comme le deuxième terme commute avec tout, on trouve

$$[S^{\mu\nu},S^{\rho\sigma}] = -\frac{1}{4}\left(\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\rho\gamma^\sigma-\gamma^\rho\gamma^\sigma\gamma^\mu\gamma^\nu\right) \tag{2.4}$$

[2] Ces dernières ne sont pas unitaires car les représentations unitaires du groupe de Lorentz sont toutes de dimension infinie. Ceci est relié au fait que le groupe de Lorentz est topologiquement non-compact, contrairement au groupe des rotations.

On se sert ensuite de la relation (2.1) pour faire passer γ^ρ et γ^σ à gauche complètement dans le premier terme, ce qui compense le deuxième terme mais génère un ensemble de termes supplémentaires :

$$[S^{\mu\nu}, S^{\rho\sigma}] = -\frac{1}{4}\left(\gamma^\mu\gamma^\sigma g^{\nu\rho} - \gamma^\nu\gamma^\sigma g^{\mu\rho} + \gamma^\rho\gamma^\mu g^{\nu\sigma} - \gamma^\rho\gamma^\nu g^{\mu\sigma}\right) \tag{2.5}$$

En utilisant encore une fois l'expression (2.3), on aboutit aux relations (1.18).

En dimension $3+1$, la plus petite représentation possible de l'algèbre de Clifford est d'ordre 4. Plusieurs représentations équivalentes sont possibles (elles diffèrent pas des transformations de similitude). Écrivons tout d'abord la représentation *chirale*:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ \mathbb{I} & 0 \end{pmatrix} \qquad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \tag{2.6}$$

où $\mathbb{I}$ est la matrice identité d'ordre 2. On utilise aussi la représentation dite *de Dirac*:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix} \qquad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix} \tag{2.7}$$

Enfin, dans la *représentation de Majorana*, toutes les matrices sont purement imaginaires :

$$\begin{aligned} \gamma^0 &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{pmatrix} \qquad & \gamma^1 &= \begin{pmatrix} i\sigma_3 & 0 \\ 0 & i\sigma_3 \end{pmatrix} \\ \gamma^2 &= \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{pmatrix} \qquad & \gamma^3 &= \begin{pmatrix} -i\sigma_1 & 0 \\ 0 & -i\sigma_1 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{2.8}$$

Dans la représentation chirale, on calcule directement que les générateurs $\mathbf{J}$ et $\mathbf{K}$ ont la forme suivante :

$$\mathbf{J} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \qquad \mathbf{K} = -\frac{1}{2}i\begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \tag{2.9}$$

Il s'ensuit que les générateurs $\mathbf{N}$ et $\bar{\mathbf{N}}$ sont

$$\mathbf{N} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \bar{\mathbf{N}} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \tag{2.10}$$

On voit que $\mathbf{N}$ et $\bar{\mathbf{N}}$ agissent dans des espaces différents, comme on s'y attendait. Notons que $\mathbf{J}$, $\mathbf{N}$ et $\bar{\mathbf{N}}$ sont hermitiques alors que $\mathbf{K}$ est antihermitique.

Un champ ψ appartenant à cette représentation du groupe de Lorentz aura donc 4 composantes et subira la variation suivante lors d'une transformation de Lorentz infinitésimale :

$$\delta\psi \;=\; -\frac{1}{2}i\varepsilon_{\alpha\beta}S^{\alpha\beta}\psi \;=\; \frac{1}{8}\varepsilon_{\alpha\beta}[\gamma^\alpha, \gamma^\beta]\psi \tag{2.11}$$

Un tel champ est appelé *champ de Dirac*. Par exemple, le générateur associé à une rotation autour de l'axe des z est

$$S^{12} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} \tag{2.12}$$

ce qui est caractéristique d'une représentation de spin $\frac{1}{2}$, pour chacun des deux spineurs qui composent ψ. On en conclut qu'un champ de Dirac représente une particule de spin $\frac{1}{2}$.

2.2 Action de Dirac

Étudions maintenant comment construire des quantités invariantes à l'aide du champ de Dirac, dans le but d'écrire une action invariante.

Notons d'abord la propriété suivante des représentations (2.6), (2.7) et (2.8) des matrices de Dirac :

$$\gamma^0\gamma^i\gamma^0 = -\gamma^i \quad \text{ou} \quad \gamma^0\gamma^\mu\gamma^0 = \gamma^{\mu\dagger} \tag{2.13}$$

Autrement dit, γ^0 est hermitique et γ^i $(i = 1, 2, 3)$ est antihermitique. Cette propriété est en fait valable dans toutes les représentations. Ceci nous permet de définir le spineur conjugué $\bar{\psi} \equiv \psi^\dagger\gamma^0$ dont la variation sous transformation de Lorentz est justement

$$\delta\bar{\psi} = \frac{1}{2}i\varepsilon_{\alpha\beta}\bar{\psi}S^{\alpha\beta} \tag{2.14}$$

Il s'ensuit que la quantité $\bar{\psi}\psi$ est invariante. En effet, sa variation est

$$\delta(\bar{\psi}\psi) = \delta\bar{\psi}\psi + \bar{\psi}\delta\psi = 0 \tag{2.15}$$

On démontre également que la quantité $\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$ est un quadri-vecteur. En effet, sa variation est

$$\begin{aligned}\delta(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) &= \delta\bar{\psi}\gamma^\mu\psi + \bar{\psi}\gamma^\mu\delta\psi \\ &= -\frac{1}{8}\varepsilon_{\alpha\beta}\bar{\psi}[[\gamma^\alpha, \gamma^\beta], \gamma^\mu]\psi\end{aligned} \tag{2.16}$$

mais l'algèbre de Clifford nous permet de calculer que

$$\begin{aligned}[[\gamma^\alpha, \gamma^\beta], \gamma^\mu] &= 2[\gamma^\alpha\gamma^\beta, \gamma^\mu] \\ &= 2\gamma^\alpha[\gamma^\beta, \gamma^\mu] + 2[\gamma^\alpha, \gamma^\mu]\gamma^\beta \\ &= 4(\gamma^\alpha\gamma^\beta\gamma^\mu + \gamma^\alpha\gamma^\mu\gamma^\beta - \gamma^\alpha g^{\mu\beta} - \gamma^\beta g^{\alpha\mu}) \\ &= 4(\gamma^\alpha g^{\beta\mu} - \gamma^\beta g^{\alpha\mu})\end{aligned} \tag{2.17}$$

et donc

$$\begin{aligned}\delta(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) &= -\frac{1}{2}\varepsilon_{\alpha\beta}\bar{\psi}(\gamma^\alpha g^{\beta\mu} - \gamma^\beta g^{\alpha\mu})\psi \\ &= \varepsilon^\mu{}_\alpha\bar{\psi}\gamma^\alpha\psi\end{aligned} \tag{2.18}$$

Ce qui est la définition même d'un quadri-vecteur.

Ces résultats nous permettent de construire une action invariante pouvant déterminer la dynamique du champ ψ. Nous disposons des quantités quadratiques invariantes suivantes :

$$\bar{\psi}\psi \qquad \bar{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi \qquad \partial^\mu\bar{\psi}\partial_\mu\psi \tag{2.19}$$

Notons que la dérivée ∂_μ n'a aucune incidence sur les propriétés de transformation de ψ ou $\bar{\psi}$, mais permet de former un invariant en vertu de la contraction des indices. Avant de construire un lagrangien, nous devons d'abord décider si le champ ψ sera un boson ou un fermion. Dans le premier cas, le terme cinétique du lagrangien devrait être $\frac{1}{2}\partial_\mu\bar{\psi}\partial^\mu\psi$. Malheureusement, ce terme n'est pas défini positif et ne peut être utilisé. Si, au contraire, le champ ψ est un fermion, alors le potentiel $V(\psi)$ figurant dans la densité lagrangienne n'a plus besoin d'être défini positif, mais le terme cinétique ci-haut n'est plus approprié: comme dans le cas du champ de Schrödinger, le terme

cinétique doit être linéaire dans la dérivée par rapport au temps. On utilise alors le terme $i\bar{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi$ (le facteur de i est ajouté pour rendre le résultat réel). Étant donné que ψ est un fermion, on peut aussi considérer l'invariant $\bar{\psi}\psi$ (si ψ était un boson, un tel terme ne serait pas défini positif). Nous écrirons donc la densité lagrangienne suivante :

$$\boxed{\mathcal{L} = i\bar{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi - m\bar{\psi}\psi} \tag{2.20}$$

L'équation classique du mouvement qui provient de cette densité lagrangienne s'obtient en variant $\bar{\psi}$ et est connue sous le nom d'*équation de Dirac*:

$$\boxed{i\gamma^\mu\partial_\mu\psi - m\psi = 0} \tag{2.21}$$

La version conjuguée de cette équation est la suivante :

$$-i\partial_\mu\bar{\psi}\gamma^\mu - m\bar{\psi} = 0 \tag{2.22}$$

Le lagrangien total L est

$$L = \int \mathrm{d}^3r \left\{ i\psi^\dagger\dot{\psi} + i\psi^\dagger\gamma^0\gamma^i\partial_i\psi - m\psi^\dagger\gamma^0\psi \right\} \tag{2.23}$$

Le moment conjugué à ψ_a est donc $i\psi_a^*$, ce qui nous permet d'écrire l'hamiltonien :

$$H = \int \mathrm{d}^3r\ \psi^\dagger(-i\gamma^0\gamma^i\partial_i + m\gamma^0)\psi \tag{2.24}$$

Les relations d'anticommutation canoniques sont

$$\{\psi_a(\mathbf{r}), \psi_b^\dagger(\mathbf{r}')\} = \delta_{ab}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tag{2.25}$$

2.3 Modes propres

Notre tâche est maintenant de diagonaliser cet hamiltonien. Commençons par l'exprimer en fonction des transformées de Fourier

$$\psi(\mathbf{r}) = \int (\mathrm{d}^3k)\ \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\tilde{\psi}(\mathbf{k}) \tag{2.26}$$

Les relations d'anticommutation deviennent

$$\{\tilde{\psi}_a(\mathbf{k}), \tilde{\psi}_b^\dagger(\mathbf{q})\} = \delta_{ab}(2\pi)^3\delta(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \tag{2.27}$$

et l'hamiltonien

$$H = \int (\mathrm{d}^3k)\ \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{k})(\gamma^0\gamma^i k_i + m\gamma^0)\tilde{\psi}(\mathbf{k}) \tag{2.28}$$

ou, en explicitant les matrices γ^μ dans la représentation de Dirac,

$$H = \int (\mathrm{d}^3k)\ \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} m & \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{k} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{k} & -m \end{pmatrix} \tilde{\psi}(\mathbf{k}) \tag{2.29}$$

Nous devons trouver les vecteurs propres et valeurs propres de la matrice figurant dans cette expression. La symétrie de cette matrice et la nullité de sa trace font que ses valeurs propres sont doublement dégénérées : deux fois $\omega_{\mathbf{k}}$ et deux fois $-\omega_{\mathbf{k}}$, où $\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2}$. Les vecteurs propres sont les suivants :

$$\begin{aligned}
&\omega_{\mathbf{k}} \begin{cases} u_1(\mathbf{k}) = \dfrac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} \begin{pmatrix} \sqrt{m+\omega_{\mathbf{k}}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \dfrac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{k}}{\sqrt{m+\omega_{\mathbf{k}}}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \\ u_2(\mathbf{k}) = \quad \text{idem avec} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{cases} \\
&-\omega_{\mathbf{k}} \begin{cases} v_1(\mathbf{k}) = \dfrac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} \begin{pmatrix} \dfrac{-\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{k}}{\sqrt{m-\omega_{\mathbf{k}}}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \sqrt{m-\omega_{\mathbf{k}}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \\ v_2(\mathbf{k}) = \quad \text{idem avec} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{cases}
\end{aligned} \tag{2.30}$$

La matrice étant hermitique, ses vecteurs propres peuvent être choisis orthonormés, comme ci-haut. Nous pouvons donc décomposer le mode $\tilde{\psi}(\mathbf{k})$ ainsi :

$$\tilde{\psi}(\mathbf{k}) = a_1 u_1(\mathbf{k}) + a_2 u_2(\mathbf{k}) + a_3 v_1(\mathbf{k}) + a_4 v_2(\mathbf{k}) \tag{2.31}$$

avec les relations d'anticommutation

$$\{a_i(\mathbf{k}), a_j^\dagger(\mathbf{q})\} = \delta_{ij}(2\pi)^3\delta(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \tag{2.32}$$

L'hamiltonien est enfin

$$H = \int (\mathrm{d}^3k)\ \omega_{\mathbf{k}} \Big\{ a_1^\dagger(\mathbf{k})a_1(\mathbf{k}) + a_2^\dagger(\mathbf{k})a_2(\mathbf{k}) - a_3^\dagger(\mathbf{k})a_3(\mathbf{k}) - a_4^\dagger(\mathbf{k})a_4(\mathbf{k}) \Big\} \tag{2.33}$$

Cet hamiltonien n'est pas défini positif si la condition $a_3|0\rangle = a_4|0\rangle = 0$ est imposée. Pour résoudre ce semblant de paradoxe, on a inventé la *mer de Dirac*, un état dans lequel tous les niveaux d'énergie négatifs (il y en a en principe une infinité, à moins d'introduire des coupures ultraviolette et infrarouge) sont occupés. Il est préférable de procéder à une transformation particule-trou, par laquelle on définit

$$b_1(\mathbf{k}) = a_3^\dagger(-\mathbf{k}) \qquad\qquad b_2(\mathbf{k}) = a_4^\dagger(-\mathbf{k}) \tag{2.34}$$

L'action de $b_1^\dagger(\mathbf{k})$ sur la mer de Dirac est donc de détruire la particule d'impulsion $-\mathbf{k}$ qui y était présente et donc de créer une antiparticule (ou trou) d'impulsion $\mathbf{k}$. On impose donc les conditions $b_1|0\rangle = b_2|0\rangle = 0$ et $a_1|0\rangle = a_2|0\rangle = 0$ sur le vide. Modulo une constante additive sans importance, l'hamiltonien peut être reformulé comme suit :

$$H = \int (\mathrm{d}^3k)\ \omega_{\mathbf{k}} \Big\{ a_1^\dagger(\mathbf{k})a_1(\mathbf{k}) + a_2^\dagger(\mathbf{k})a_2(\mathbf{k}) + b_1^\dagger(\mathbf{k})b_1(\mathbf{k}) + b_2^\dagger(\mathbf{k})b_2(\mathbf{k}) \Big\} \tag{2.35}$$

Le théorème de Noether nous permet d'identifier deux quantités conservées dans le cadre de l'action de Dirac. La première est l'impulsion. On montre facilement que

$$\begin{aligned}
\mathbf{P} &= \int (\mathrm{d}^3k)\ \mathbf{k} \Big\{ a_1^\dagger(\mathbf{k})a_1(\mathbf{k}) + a_2^\dagger(\mathbf{k})a_2(\mathbf{k}) + a_3^\dagger(\mathbf{k})a_3(\mathbf{k}) + a_4^\dagger(\mathbf{k})a_4(\mathbf{k}) \Big\} \\
&= \int (\mathrm{d}^3k)\ \mathbf{k} \Big\{ a_1^\dagger(\mathbf{k})a_1(\mathbf{k}) + a_2^\dagger(\mathbf{k})a_2(\mathbf{k}) + b_1^\dagger(\mathbf{k})b_1(\mathbf{k}) + b_2^\dagger(\mathbf{k})b_2(\mathbf{k}) \Big\}
\end{aligned} \tag{2.36}$$

Dans la deuxième équation, le changement de variables $\mathbf{k} \to -\mathbf{k}$ a été effectué pour les deux derniers termes. La forme précise de la transformation (2.34) (avec le signe $-$) a été choisie de sorte que tous les termes aient le même signe dans cette expression.

Une autre quantité conservée, la charge électrique, existe en vertu de l'invariance par rapport aux transformations de phase $\psi \to \mathrm{e}^{i\theta}\psi$. Le quadri-courant associé est $j^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\psi$. On montre facilement que ce courant est conservé à l'aide de l'équation de Dirac, sans nécessairement passer par toute la machinerie du théorème de Noether :

$$\partial_\mu j^\mu = \partial_\mu\bar{\psi}\gamma^\mu\psi + \bar{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi \tag{2.37}$$

mais l'équation de Dirac est $\gamma^\mu\partial_\mu\psi = -im\psi$ et sa version conjuguée est $\partial_\mu\bar{\psi}\gamma^\mu = im\bar{\psi}$. On trouve donc l'équation de continuité $\partial_\mu j^\mu = 0$, ce qui démontre que $j^0 = \bar{\psi}\gamma^0\psi = \psi^\dagger\psi$ est la densité d'une quantité conservée Q:

$$\begin{aligned} Q &= \int \mathrm{d}^3r\ \psi^\dagger\psi \\ &= \int (\mathrm{d}^3k)\ \Big\{a_1^\dagger(\mathbf{k})a_1(\mathbf{k}) + a_2^\dagger(\mathbf{k})a_2(\mathbf{k}) - b_1^\dagger(\mathbf{k})b_1(\mathbf{k}) - b_2^\dagger(\mathbf{k})b_2(\mathbf{k})\Big\} \end{aligned} \tag{2.38}$$

L'interprétation physique de ces résultats est la suivante. L'opérateur $a_1^\dagger(\mathbf{k})$ crée un électron de spin en haut et d'impulsion $\mathbf{k}$. $a_2^\dagger(\mathbf{k})$, lui, crée un électron de spin en bas. Les opérateurs $b_1^\dagger(\mathbf{k})$ et $b_2^\dagger(\mathbf{k})$ créent respectivement des *positrons* de spins en haut et en bas. Les positrons ont une charge électrique opposée à celle des électrons : on dit que ce sont les *antiparticules* des électrons. Leur existence a été prédite par Dirac sur la base de l'invariance relativiste avant leur découverte expérimentale, ce qui valut à Dirac un prix Nobel.

La symétrie de phase de l'action de Dirac nous permet de coupler le champ ψ au champ électromagnétique par couplage minimal. Le lagrangien décrivant l'électron relativiste en interaction avec le champ électromagnétique est donc

$$\mathcal{L} = i\bar{\psi}(\partial_\mu + iqA_\mu)\gamma^\mu\psi - m\bar{\psi}\psi \tag{2.39}$$

où A_μ est le potentiel électromagnétique et $q = -e$.

2.4 Limite non relativiste

Dans cette sous-section nous allons prendre la limite non relativiste de l'équation de Dirac en présence d'un champ électromagnétique. Écrivons le spineur ψ comme $\psi = (\varphi, \chi)$, où φ et χ sont eux-mêmes des spineurs à deux composantes. En présence d'un champ électromagnétique, l'équation de Dirac devient

$$[(i\partial_\mu - qA_\mu)\gamma^\mu - m]\psi = 0 \tag{2.40}$$

Si on définit la quantité de mouvement $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} - q\mathbf{A}$, celle-ci devient

$$\begin{aligned} i\partial_0\varphi - q\phi\varphi - \boldsymbol{\pi}\cdot\boldsymbol{\sigma}\chi - m\varphi = 0 \\ -i\partial_0\chi + q\phi\chi + \boldsymbol{\pi}\cdot\boldsymbol{\sigma}\varphi - m\chi = 0 \end{aligned} \tag{2.41}$$

Nous avons vu que les valeurs propres de l'hamiltonien de Dirac libre existent en paires opposées : il y a donc des solutions à énergie positive (électrons) et des solutions à énergie négative (positrons). Concentrons-nous sur les solutions à énergie positive avec énergie cinétique et potentielle faibles par rapport à l'énergie de repos m (approximation non relativiste). En première approximation, l'énergie des solutions est $\omega = m$ et la dépendance en temps est donnée par $\psi(t) = \psi(0)\exp -imt$. Il est alors sage de définir les champs lents Φ et X:

$$\varphi = \mathrm{e}^{-imt}\Phi \qquad\qquad \chi = \mathrm{e}^{-imt}X \tag{2.42}$$

Notons que $X \ll \Phi$ dans une solution d'énergie positive non relativiste. L'équation de Dirac devient alors

$$\begin{aligned} i\dot{\Phi} &= \boldsymbol{\pi}\cdot\boldsymbol{\sigma}X + q\phi\Phi \\ i\dot{X} &= \boldsymbol{\pi}\cdot\boldsymbol{\sigma}\Phi + q\phi X - 2mX \end{aligned} \tag{2.43}$$

Dans cette approximation non relativiste à faible champ, $q\phi \ll 2m$ et $\dot{X} \ll mX$ (le champ X varie lentement). On peut donc poser $X \approx (\boldsymbol{\pi}\cdot\boldsymbol{\sigma}/2m)\Phi$ et on obtient

$$i\dot{\Phi} = \left[\frac{(\boldsymbol{\pi}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2}{2m} + q\phi\right]\Phi \tag{2.44}$$

Maintenant,

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\pi}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2 &= \sigma_i\sigma_j\pi_i\pi_j \\ &= (\delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k)\pi_i\pi_j \\ &= \boldsymbol{\pi}^2 - q\varepsilon_{ijk}\sigma_k(\hat{\partial}_i A^j + A^i\hat{\partial}_j) \\ &= \boldsymbol{\pi}^2 - q\varepsilon_{ijk}\sigma_k(\hat{\partial}_i A^j - A^j\hat{\partial}_i) \\ &= \boldsymbol{\pi}^2 - q\varepsilon_{ijk}\sigma_k(\partial_i A^j) \\ &= \boldsymbol{\pi}^2 - qB_k\sigma_k \end{aligned} \tag{2.45}$$

Notez que, dans la troisième et la quatrième de ces équations, la dérivée $\hat{\partial}_i$ est un opérateur (d'où le signe ˆ) alors que dans la cinquième elle n'agit que sur A^j. Comme $\boldsymbol{\pi}^2 = (\mathbf{P} - q\mathbf{A})^2$, on retrouve l'*équation de Pauli*:

$$\boxed{i\dot{\Phi} = \frac{1}{2m}(\mathbf{P} - q\mathbf{A})^2\Phi - \frac{q}{2m}\mathbf{B}\cdot\boldsymbol{\sigma}\Phi + q\phi\Phi} \tag{2.46}$$

Cette équation est en fait l'équation de Schrödinger, dans laquelle le couplage minimal a été augmenté d'un couplage de type Zeeman $-\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B}$ où le moment magnétique de l'électron est (après restauration de c et $\hbar$ et de $q = -e$)

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma} = -g\frac{e}{2mc}\mathbf{S} \tag{2.47}$$

(notez que e est ici une constante positive). L'équation de Dirac prédit donc que le facteur g de l'électron est égal à 2. D'après les dernières mesures de précision, ce facteur est en fait égal à

$$g = 2(1 + a) \qquad\qquad a = 0.001\ 596\ 521\ 884(43) \tag{2.48}$$

où a est l'*anomalie* du facteur magnétique (les chiffres entre parenthèses représentent l'erreur sur le nombre correspondant de chiffres dans l'expression). Cette anomalie est explicable par des

effets quantiques (self-énergie et polarisation du vide par paires électron-positron virtuelles). J. Schwinger (1948) a calculé que $a = \alpha/2\pi = 0.001\ 62\ldots$ ($\alpha = e^2/\hbar c$ est la constante de structure fine). L'estimation théorique de T. Kinoshita (1988), basée sur un calcul au quatrième ordre en théorie des perturbations, est

$$a = C_1(\alpha/\pi) + C_2(\alpha/\pi)^2 + C_3(\alpha/\pi)^3 + C_4(\alpha/\pi)^4 + \delta a \tag{2.49}$$

où les coefficients C_i sont le résultats d'intégrales cinématiques (diagrammes de Feynman) et le δa ($\sim 4,46.10^{-12}$) provient d'autres effets (boucles de muons, de taus, effets hadroniques et électrofaibles). La valeur numérique basée sur la valeur de α obtenue par l'effet Hall quantique est

$$a = 0.001\ 596\ 521\ 92(17)(73)(108) \tag{2.50}$$

Les trois sources d'erreur proviennent respectivement de C_3, C_4 et α. L'accord entre la théorie et l'expérience pour cette quantité est sans égal dans toute la physique théorique. En fait, on peut utiliser cet accord pour redéfinir la constante de structure fine :[1]

$$\alpha^{-1} = 137.035\ 991\ 4(11) \tag{2.51}$$

Problème 2.1 *Matrices de Dirac*

Nous avons écrit pendant le cours une ou deux représentations des matrices de Dirac en dimension 3+1. Dans ce cas la taille la plus petite possible pour ces matrices était 4. Donnez une représentation des matrices de Dirac de taille *minimale* en dimension 1+1 et en dimension 2+1.

Problème 2.2 *Transformation des spineurs de Dirac*

Nous avons donné une expression pour les spineurs de Dirac associés à des états à impulsion donnée (Éq.(2.30)). Au lieu d'obtenir ces spineurs par diagonalisation de l'hamiltonien, nous aurions pu résoudre l'équation de Dirac en supposant une dépendance spatio-temporelle du type $\exp i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)$.

a) Trouvez les spineurs de Dirac pour le cas $\mathbf{k} = 0$ à partir de l'équation de Dirac.

b) Retrouvez l'expression (2.30) pour $u_1(\mathbf{k})$ en effectuant une transformation de Lorentz (changement de référentiel) sur le spineur $u_1(0)$. Supposez que $\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{z}}$.

Problème 2.3 *Propriétés de transformation*

Montrez que $\bar{\psi}S^{\mu\nu}\psi$ est un tenseur, où $S^{\mu\nu} = \frac{1}{4}i[\gamma^\mu, \gamma^\nu]$.

Problème 2.4 *Propriétés de transformation*

Montrez que $\bar{\psi}\psi$ et $\partial^\mu\bar{\psi}\partial_\mu\psi$ sont des invariants, en tenant compte de la partie orbitale du générateur des transformations de Lorentz.

Problème 2.5 *Équation de Dirac en 1 dimension*

La structure de l'équation de Dirac est la même dans toutes les dimensions, du moins si on ne s'intéresse pas aux propriétés sous inversion de l'espace (parité). En particulier, en 1 dimension spatiale, on peut choisir les matrices de Dirac suivantes, en fonction des matrices de Pauli :

$$\gamma^0 = \sigma_3 \qquad\qquad \gamma^1 = i\sigma_1$$

Votre tâche dans ce problème consiste à trouver les modes propres de l'équation de Dirac en 1 dimension, c'est-à-dire à trouver l'équivalent des Éq. (2.30) et (2.35), en expliquant bien chaque étape de votre calcul. Votre point de départ peut être l'Éq. (2.24).

---

[1] Voir T. Kinoshita, IEEE transactions on instrumentation and measurement **38** (1989) 172.

CHAPITRE 9

Méthodes Fonctionnelles

1 Intégrales de Chemins

La description d'un système quantique peut se faire de deux façons, souvent complémentaires. La première est la *quantification canonique*, qui a été utilisée jusqu'ici dans ce cours. Selon cette méthode, les quantités classiques sont remplacées par des opérateurs linéaires qui agissent dans un espace de Hilbert dans lequel résident les états physiques du système considéré. Cette méthode a été la première utilisée : son développement coïncide avec la mise au point de la mécanique quantique vers 1925-26. Son principal avantage est sa facilité d'emploi. Elle a cependant le désavantage d'être peu intuitive. L'autre méthode, que nous expliquerons brièvement dans ce chapitre, a été développée vers 1948 par R.P. Feynman et porte le nom d'*intégration fonctionnelle*. En particulier, lorsqu'on l'applique à un système composé d'une particule ou d'un nombre fini de particules, le nom d'*intégrales de chemins* est approprié. Cette méthode possède les avantages suivants :

- Elle est plus intuitive, car la notion de trajectoire reprend quelques uns de ses droits.
- Elle permet certaines manipulations formelles, en particulier des changements de variables, avec une plus grande facilité que la quantification canonique, car elle se fonde sur l'espace des configurations et non sur l'espace des phases.
- Elle offre une analogie fructueuse avec la mécanique statistique. En retour, elle permet à la mécanique statistique de jouir des avantages des méthodes opératorielles (matrice de transfert).

En pratique ces avantages deviennent apparents lorsqu'on considère des systèmes ayant un nombre infini de degrés de liberté (théorie des champs). L'intégration fonctionnelle est peu usitée dans le cas de systèmes simples, comme celui d'une particule dans un potentiel, sauf pour fins pédagogiques. Nous commencerons néanmoins par ce cas.

1.1 Système à un degré de liberté

Ici nous allons 'démontrer' la méthode d'intégration fonctionnelle à partir de la quantification canonique, dans le cas d'un système à un degré de liberté: celui d'une particule de masse m se déplaçant dans un potentiel $V(x)$. L'hamiltonien de ce système est indépendant du temps :

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X) \qquad , \qquad [X, P] = i \tag{1.1}$$

Rappelons que les opérateurs sont ici représentés par une lettre majuscule, alors que les quantités classiques correspondantes (ou les valeurs propres) le sont par une lettre minuscule. L'opérateur d'évolution temporelle est donné par

$$U(t) = \mathrm{e}^{-iHt} \tag{1.2}$$

(pour simplifier les expressions, nous avons posé $\hbar = 1$).

Ce qui nous intéresse ici est le *propagateur*, c'est-à-dire l'élément de matrice de l'opérateur d'évolution dans la base des positions :

$$U(x_f, t_f|x_i, t_i) \equiv \langle x_f| \exp -i(t_f - t_i)H|x_i\rangle \tag{1.3}$$

Étant donné une particule observée au point x_i et au temps t_i, le propagateur $U(x_f, t_f|x_i, t_i)$ donne l'amplitude de probabilité pour que la particule soit observée au point x_f, au temps t_f. Commençons par calculer le propagateur pour un temps infinitésimal $\epsilon = t_f - t_i$. Les calculs seront faits au premier ordre en ϵ. Premièrement, en utilisant la relation de Campbell-Baker-Hausdorff, on trouve

$$\langle x_f|\mathrm{e}^{-iH\epsilon}|x_i\rangle = \langle x_f|\mathrm{e}^{-iK\epsilon}\mathrm{e}^{-iV\epsilon}\mathrm{e}^{[K,V]\epsilon^2}|x_i\rangle \tag{1.4}$$

où $K = P^2/2m$ est l'énergie cinétique. Au premier ordre en ϵ, on peut négliger le dernier facteur. On insère ensuite une relation de complétude sur les impulsions :

$$\begin{aligned}
\langle x_f|\mathrm{e}^{-iH\epsilon}|x_i\rangle &= \int (\mathrm{d}p)\ \langle x_f|\mathrm{e}^{-iK\epsilon}|p\rangle\langle p|\mathrm{e}^{-iV\epsilon}|x_i\rangle \\
&= \int (\mathrm{d}p)\ \exp -i\Big\{\epsilon\frac{p^2}{2m} - p(x_f - x_i) + \epsilon V(x_i)\Big\} \\
&= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\epsilon}}\exp i\epsilon\left\{\frac{1}{2}m\frac{(x_f - x_i)^2}{\epsilon^2} - V(x_i)\right\}
\end{aligned} \tag{1.5}$$

La dernière équation est obtenue en complétant le carré et en calculant l'intégrale gaussienne. ce dernier calcul n'est valide que si ϵ a une petite partie imaginaire négative, ce qui sera implicite dans ce qui suit.

La quantité entre accolades n'est rien d'autre que l'action infinitésimale $S(x_i, x_f; \epsilon)$ associée au passage du système de la position x_i à la position x_f dans un temps ϵ. Au premier ordre, on peut donc écrire

$$\langle x_f|U(\epsilon)|x_i\rangle \ = \ \sqrt{\frac{m}{2\pi i\epsilon}}\exp iS(x_i, x_f; \epsilon) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \tag{1.6}$$

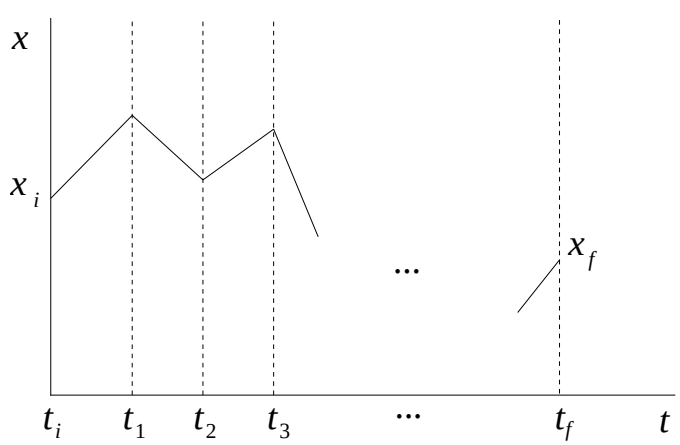


Figure 1.1. L'insertion de relations de complétude entre les états initial et final génère toutes les trajectoires possibles, sur lesquelles on intègre pour obtenir l'amplitude de transition, ou *propagateur*.

À partir de cette expression, le propagateur sur un temps fini peut être obtenu en divisant l'intervalle $t = t_f - t_i$ en N intervalles infinitésimaux t/N ($N \to \infty$) et en insérant des relations de complétude à chacun des $N-1$ instants intermédiaires.

$$\begin{aligned}\langle x_f|U(t)|x_i\rangle \;\approx\; \int \prod_{j=1}^{N-1} \mathrm{d}x_j \;\langle x_f|U(t/N)|x_{N-1}\rangle \times \\ \langle x_{N-1}|U(t/N)|x_{N-2}\rangle \ldots \langle x_1|U(t/N)|x_i\rangle\end{aligned} \tag{1.7}$$

L'erreur commise en utilisant la formule (1.6) à chaque instant est de l'ordre $1/N^2$ et l'erreur totale de l'ordre de $1/N$. Donc, dans la limite $N \to \infty$ on peut écrire

$$\langle x_f|U(t)|x_i\rangle \;=\; \lim_{N\to\infty} \left\{\frac{mN}{2\pi i t}\right\}^{N/2} \int \prod_{j=1}^{N-1} \mathrm{d}x_j \;\exp iS[x] \tag{1.8}$$

où $S[x]$ est l'action associée à la trajectoire discrète x_j, $j = 0, 1 \ldots N$ (on pose $x_0 = x_i$ et $x_N = x_f$). Si on définit la *mesure d'intégration fonctionnelle* suivante :

$$[\mathrm{d}x] \;=\; \lim_{N\to\infty} \prod_{j=1}^{N-1} \left\{\sqrt{\frac{mN}{2\pi i t}}\mathrm{d}x_j\right\} \tag{1.9}$$

alors notre résultat fondamental peut s'écrire comme suit :

$$\boxed{\langle x_f|U(t)|x_i\rangle \;=\; \int_{(x_i,t_i)}^{(x_f,t_f)} [\mathrm{d}x] \;\exp iS[x]} \tag{1.10}$$

où l'action est, bien entendu, donnée par

$$S[x] \;=\; \int \mathrm{d}t\; (\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)) \tag{1.11}$$

L'interprétation de (1.10) est la suivante. Chaque trajectoire possible allant de x_i à x_f dans un temps t contribue à l'amplitude $\langle x_f|U(t)|x_i\rangle$ avec un poids égal à l'exponentielle complexe de son action. La plupart des trajectoires sont très irrégulières et contribuent peu au propagateur, car leur énergie cinétique est élevée et varie grandement, ce qui provoque, d'une trajectoire à l'autre, de fortes oscillations de l'exponentielle complexe : leurs contributions s'annulent mutuellement. Les trajectoires qui contribuent le plus au propagateur sont celles pour lesquelles l'exponentielle varie le moins possible, c'est-à-dire les trajectoires qui se situent près de la trajectoires classique, dont l'action est stationnaire (au sens variationnel). Pour rendre ce commentaire plus précis, rétablissons les facteurs de $\hbar$ qui ont été supprimés jusqu'ici : vu que $\hbar$ a les dimensions de l'action, il suffit de remplacer l'action S par $S/\hbar$, de sorte que l'argument de l'exponentielle soit sans dimension. En gros, on peut dire que les trajectoires qui contribuent appréciablement à l'amplitude sont celles dont l'action ne diffère de l'action classique $S[x_c]$ que par un terme d'ordre $\sim \hbar$. La limite classique est obtenue quand l'action de la trajectoire classique est beaucoup plus grande que $\hbar$: $S[x_c] \gg \hbar$. C'est le principe de correspondance. Dans le cas contraire les fluctuations d'ordre $\hbar$ autour de l'action classique proviennent d'un ensemble de trajectoires très différentes de la trajectoire classique et un calcul quantique complet est nécessaire, c'est-à-dire une calcul exact de (1.10).

Le propagateur peut être utilisé pour exprimer l'amplitude de probabilité qu'un état $|\psi_i\rangle$ évolue dans un temps t vers un autre état $|\psi_f\rangle$. En effet,

$$\langle\psi_f|U(t_f-t_i)|\psi_i\rangle \;=\; \int \mathrm{d}x_i\mathrm{d}x_f\;\psi_f^*(x_f)\psi_i(x_i)\langle x_f|U(t_f-t_i)|x_i\rangle \tag{1.12}$$

où $\psi_i(x)=\langle x|\psi_i\rangle$ est la fonction d'onde de l'état $|\psi_i\rangle$ (idem pour $\psi_f(x)=\langle x|\psi_f\rangle$).

Signalons enfin que, dans la base des fonctions propres de l'hamiltonien, le propagateur a une forme particulièrement simple :

$$\begin{aligned} U(x_f,t|x_i,0) &= \langle x_f|\mathrm{e}^{-iHt}|x_i\rangle \\ &= \sum_n \langle x_f|n\rangle \mathrm{e}^{-iE_nt}\langle n|x_i\rangle \\ &= \sum_n \varphi_n(x_f)\varphi_n^*(x_i)\mathrm{e}^{-iE_nt} \end{aligned} \tag{1.13}$$

Connaissant le propagateur exactement, on peut donc en extraire les niveaux d'énergie E_n et les fonctions propres φ_n de l'hamiltonien, à une phase arbitraire près.

1.2 Action quadratique

Entre deux points (x_i,t_i) et (x_f,t_f) il existe toujours une trajecoire classique $x_c(t)$. On peut donc décomposer une trajectoire arbitraire $x(t)$ ainsi : $x(t)=x_c(t)+y(t)$, où $y(t_i)=y(t_f)=0$. On peut considérer le passage de $x(t)$ à $y(t)$ comme un changement de variables fonctionnel, mais un changement très simple, puisqu'en chaque instant la nouvelle variable ne diffère de l'ancienne que par une constante $x_c(t)$. Le jacobien de ce changement de variable est donc unité, c'est-à-dire que $[\mathrm{d}x]=[\mathrm{d}y]$. De plus, on a le développement de Taylor suivant :

$$S[x]=S[x_c]+\int \mathrm{d}t\;\frac{\delta S}{\delta x(t)}y(t)+\frac{1}{2}\int \mathrm{d}t\mathrm{d}t'\;\frac{\delta^2 S}{\delta x(t)\delta x(t')}y(t)y(t')+\cdots \tag{1.14}$$

où toutes les variations sont calculées à la trajectoire classique x_c. Par définition de x_c, le deuxième terme est donc nul. Au deuxième ordre, on peut donc écrire

$$U(x_f,t_f|x_i,t_i)=\mathrm{e}^{iS[x_c]}\;\int_0^0[\mathrm{d}y]\;\exp\left\{\frac{i}{2}\int_{t_i}^{t_f}\mathrm{d}t\mathrm{d}t'\;\frac{\delta^2 S}{\delta x(t)\delta x(t')}\bigg|_c y(t)y(t')\right\} \tag{1.15}$$

Dans le cas d'une action quadratique en $x(t)$, comme celle d'une particule libre ou d'un oscillateur harmonique, cette approximation au deuxième ordre est exacte. Écrivons l'action quadratique générale

$$S[x(t)]=\int \mathrm{d}t\;(a\dot{x}^2+bx\dot{x}+cx^2+d\dot{x}+ex+f) \tag{1.16}$$

où $a,b,\ldots,f$ sont en général des fonctions de t. Nous supposerons cependant que a, b et c sont indépendants du temps. Le développement au deuxième ordre donne

$$\begin{aligned} U(x_f,t_f|x_i,t_i) &= \mathrm{e}^{iS[x_c]}\;\int_0^0[\mathrm{d}y]\;\exp i\int_{t_i}^{t_f}\mathrm{d}t\;(a\dot{y}^2+by\dot{y}+cy^2) \\ &= \mathrm{e}^{iS[x_c]}\;f(T) \qquad\qquad (T\equiv t_f-t_i) \end{aligned} \tag{1.17}$$

où $f(T)$ est une fonction de l'intervalle de temps écoulé seulement, puisque le lagrangien, en fonction de y, ne dépend pas explicitement du temps t. Toute la dépendance dans les conditions initiale et finale se retrouve dans $S[x_c]$.

Propagateur d'une particule libre
Le cas le plus simple d'action quadratique est celui d'une particule libre de masse m, pour lequel $a = \frac{1}{2}m$ et $b = c = \cdots = f = 0$. Calculons l'intégrale de chemin explicitement dans ce cas. En effectuant la décomposition de l'intervalle de temps en N petits intervalles, avec une trajectoire discrète x_i, où $i = 0, 1, \ldots, N$, le propagateur devient $U = \lim_{N\to\infty} U_N$ où

$$U_N = \frac{1}{A}\int \frac{\mathrm{d}x_1}{A}\cdots\frac{\mathrm{d}x_{N-1}}{A}\exp\frac{im}{2\varepsilon}\Big\{(x_1-x_0)^2 + (x_2-x_1)^2+\cdots+(x_N-x_{N-1})^2\Big\} \tag{1.18}$$

où $A = \sqrt{2\pi i\varepsilon/m}$ et $\varepsilon = T/N$. Il suffit d'intégrer sur x_1, x_2, etc. en succession. À chaque étape l'intégrale est gaussienne. Par exemple, après avoir intégré sur x_1 on obtient

$$U = \sqrt{\frac{m}{4\pi i\varepsilon}}\int \frac{\mathrm{d}x_2}{A}\cdots\frac{\mathrm{d}x_{N-1}}{A}\exp\frac{im}{2\varepsilon}\Big\{(x_2-x_0)^2/2 + (x_3-x_2)^2+\cdots+(x_N-x_{N-1})^2\Big\} \tag{1.19}$$

Après avoir intégré sur x_2 on obtient

$$U = \sqrt{\frac{m}{6\pi i\varepsilon}}\int \frac{\mathrm{d}x_3}{A}\cdots\frac{\mathrm{d}x_{N-1}}{A}\exp\frac{im}{2\varepsilon}\Big\{(x_3-x_0)^2/3 + (x_4-x_3)^2+\cdots+(x_N-x_{N-1})^2\Big\} \tag{1.20}$$

et ainsi de suite. On voit que le résultat final est le suivant :

$$\boxed{U = \sqrt{\frac{m}{2\pi iT}}\exp i\frac{m(x_f-x_i)^2}{2T}} \tag{1.21}$$

D'autre part, l'action classique $S[x_c]$ provient dans ce cas de la trajectoire linéaire $x_c(t) = x_i + (x_f - x_i)t/T$. On calcule donc que $S[x_c] = m(x_f - x_i)^2/2T$. On voit que la formule (1.17) est applicable, avec $f(T) = \sqrt{m/2\pi iT}$.

1.3 Oscillateur harmonique

Calculons maintenant le propagateur pour un oscillateur harmonique, dont l'action est quadratique avec $a = \frac{1}{2}m$ et $c = -\frac{1}{2}m\omega^2$. Utilisons pour cela la formule (1.17): nous devons calculer $S[x_c]$ et calculer la dépendance en ω de $f(T)$ (nous connaissons la forme de $f(T)$ pour $\omega = 0$). Nous savons que la trajectoire classique a la forme suivante :

$$x(t) = A\sin\omega t + B\cos\omega t \qquad \begin{aligned} x_i &= B \\ x_f &= A\sin\omega T + B\cos\omega T \end{aligned} \tag{1.22}$$

En substituant dans l'action , on trouve

$$S[x_c] = \frac{m\omega}{2\sin\omega T}\left\{(x_i^2 + x_f^2)\cos\omega T - 2x_i x_f\right\} \tag{1.23}$$

D'autre part, la fonction $f(T)$ est par définition

$$f(T) = \int_0^0 [\mathrm{d}y] \ \exp i\frac{1}{2}m\int_0^T (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2)\mathrm{d}t \tag{1.24}$$

Développons $y(t)$ en série de Fourier :

$$y(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin\frac{n\pi t}{T} \tag{1.25}$$

Effectuons un changement de variables dans l'intégrale fonctionnelle : passons de $y(t)$ à l'ensemble des coefficients de Fourier $\{a_n\}$. L'action devient

$$S[y] = \frac{1}{4}mT\sum_n \left[(n\pi/T)^2 - \omega^2\right] a_n^2 \tag{1.26}$$

et la mesure d'intégration fonctionnelle devient

$$[\mathrm{d}y] \to J(T)\prod_n da_n \tag{1.27}$$

où $J(T)$ est le Jacobien du changement de variable, qui dépend de T mais pas de ω. L'intégrale sur les a_n est gaussienne et se fait facilement. On trouve

$$\begin{aligned} f(T) &\propto \prod_n \left(\frac{n^2\pi^2}{T^2} - \omega^2\right)^{-1/2} \\ &\propto \prod_n \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2\pi^2}\right)^{-1/2} \\ &\propto \sqrt{\frac{\omega T}{\sin\omega T}} \end{aligned} \tag{1.28}$$

où à chaque étape la constante de proportionalité ne dépend pas de ω. Nous avons utilisé l'identité suivante :[1]

$$\prod_{n=1}^{\infty}\left(1 - \frac{z^2}{n^2\pi^2}\right) = \frac{\sin z}{z} \tag{1.29}$$

Quand $\omega = 0$ on doit retrouver le cas d'une particule libre, dont on connait le propagateur. On en conclut que

$$\boxed{U = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \sin\omega T}}\exp iS[x_c]} \tag{1.30}$$

où $S[x_c]$ est donné plus haut.

À partir de cette expression du propagateur, on peut retrouver les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique en comparant avec l'expression (1.13). Pour ce faire,

[1] Voir Gradshteyn et Ryzhik, formule 1.431, ou Euler, *Introductio in Analysin Infinitorum*, Lausanne (1748).

définissons la variable $z = \mathrm{e}^{-i\omega T}$, en fonction de laquelle nous pouvons exprimer le propagateur ainsi :

$$U = \sqrt{\frac{m\omega z}{1-z^2}} \exp\left\{-\frac{m\omega}{1-z^2}\left[(x_i^2+x_f^2)(1+z^2) - z x_i x_f\right]\right\} \tag{1.31}$$

Il est clair que cette expression admet un développement en série de puissances entières de z, multiplié par $\sqrt{z}$, ce qui démontre, en comparant avec l'expression (1.13), que les niveaux d'énergie de l'oscillateur sont $E_n = (n+\frac{1}{2})\omega$. Les premiers termes de ce développement sont

$$\begin{aligned} U = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi}} z^{1/2} \mathrm{e}^{-m\omega x_i^2/2} \mathrm{e}^{-m\omega x_f^2/2} \Big\{ & 1 + 2m\omega x_i x_f z + \frac{1}{2} m\omega (2m\omega x_i^2 - 1)(2m\omega x_f^2 - 1) z^2 \\ & + \frac{1}{3} m\omega x_i (2m\omega x_i^2 - 3) x_f (2m\omega x_f^2 - 3) z^3 \\ & + \frac{1}{24}(4m^2\omega^2 x_i^4 - 12 m\omega x_i^2 + 3)(4m^2\omega^2 x_f^4 - 12 m\omega x_f^2 + 3) z^4 \\ & + \frac{1}{60} m\omega x_i (4m^2\omega^2 x_i^4 - 20 m\omega x_i^2 + 15) x_f (4m^2\omega^2 x_f^4 - 20 m\omega x_f^2 + 15) z^5 + \cdots \Big\} \end{aligned} \tag{1.32}$$

On constate que chaque terme du développement se factorise en une fonction de x_i fois une fonction de x_f. Celles-ci sont les fonctions d'onde normalisées de l'oscillateur harmonique.

1.4 Effet Aharonov-Bohm

Le formalisme de l'intégrale de chemins permet une étude particulièrement élégante de l'effet Aharonov-Bohm. Rappelons d'abord ce qu'est l'effet Aharonov-Bohm. Considérons la figure ci-dessous, illustrant une expérience d'interférence entre deux faisceaux d'électrons forcés de passer d'un côté et de l'autre d'un solénoïde quasi-infini dans lequel existe un champ magétique constant; le champ à l'extérieur du solénoïde est nul et les électrons ne peuvent pénétrer le solénoïde. Les électrons ne peuvent donc pas sentir le champ magnétique directement, mais une variation du champ magnétique produit un déplacement des raies d'interférence! Cet effet a été observé expérimentalement et démontre clairement que ce ne sont pas les champs électromagnétiques eux-mêmes qui sont importants, mais plutôt leurs potentiels, comme nous allons maintenant l'expliquer.

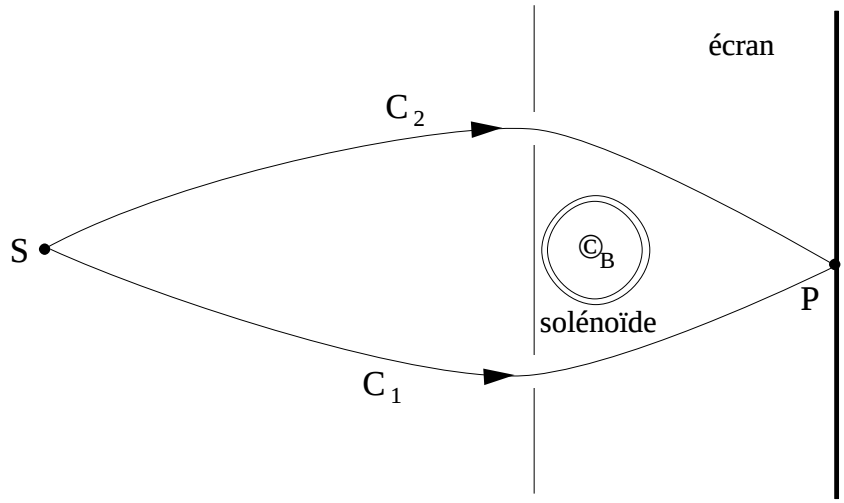


Figure 1.2. Schéma du dispositif d'Aharonov-Bohm.

L'action d'une particule non relativiste de charge e dans un champ électromagnétique décrit par les potentiels électromagnétiques ϕ et $\mathbf{A}$ est

$$S = \int \mathrm{d}t \; (\frac{1}{2}m\dot{\mathbf{r}}^2 - e\phi(\mathbf{r}) + \frac{e}{c}\mathbf{A}\cdot\dot{\mathbf{r}}) \tag{1.33}$$

Cette action est invariante par rapport aux transformations de jauge (1.12). Plus précisément, elle ne change que par une constante :

$$S \to S - \frac{e}{c}(\xi(t_f) - \xi(t_i)) \tag{1.34}$$

Dans le cas d'un champ magnétique indépendant du temps, l'action ci-haut se réduit à

$$S = \frac{1}{2}m\int \mathrm{d}t \; \dot{\mathbf{r}}^2 + \frac{e}{c}\int \mathrm{d}\mathbf{r}\cdot\mathbf{A} \tag{1.35}$$

Dans le formalisme des intégrales de chemins, l'amplitude de probabilité pour que la particule parte de la source S et aboutisse à un point donné P de l'écran est une somme sur toutes les trajectoires possibles. Or, dans ce problème, toutes les trajectoires possibles ne peuvent pas être incluses dans la même intégrale de chemins, puisqu'elles ne peuvent pas toutes être obtenues les unes des autres par des déformations infinitésimales. En d'autres termes, l'ensemble des trajectoires allant de S à P peuvent être regroupées en *classes topologiques*, chaque classe étant caractérisée par un *nombre d'enroulement* n qui compte le nombre de tours (positif, négatif ou nul) que fait la trajectoire autour du solénoïde, par rapport à une trajectoire de référence (comme par exemple celle illustrée sur la figure). Deux trajectoires ayant des nombres d'enroulement différents ne peuvent être déformées de manière continue l'une vers l'autre. Soit $C[n]$ l'ensemble des chemins ayant un nombre d'enroulement n. Sur chaque classe $C[n]$ on peut définir une intégrale de chemins donnant une contribution U_n au propagateur. Le propagateur complet est la somme des propagateurs des différentes classes de trajectoires :

$$U = \sum_n U_n \tag{1.36}$$

Ce résultat est tout-à-fait analogue à celui d'une intégrale ordinaire sur un domaine de l'axe réel constitué de plusieurs domaines connexes séparés : on doit sommer les intégrales prises séparément sur chacun des domaines connexes.

La partie magnétique de l'action ne dépend pas de la trajectoire particulière empruntée par la particule, mais uniquement de la classe topologique d'enroulement. En effet, prenons deux trajectoires C et C' appartenant à la même classe. La différence entre les parties magnétiques des actions de ces deux trajectoires est égale au flux magnétique traversant la courbe fermée $C - C'$ formée par l'adjonction de ces deux trajectoires, prises en sens inverses l'une de l'autre :

$$\begin{aligned} \frac{e}{c}\int_C \mathrm{d}\mathbf{r}\cdot\mathbf{A} - \frac{e}{c}\int_{C'} \mathrm{d}\mathbf{r}\cdot\mathbf{A} &= \frac{e}{c}\oint_{C-C'} \mathrm{d}\mathbf{r}\cdot\mathbf{A} \\ &= \frac{e}{c}\int_{C-C'} \mathrm{d}\mathbf{s}\cdot\nabla\wedge\mathbf{A} \\ &= \frac{e}{c}\Phi_B[C-C'] \end{aligned} \tag{1.37}$$

Or ce flux est nul puisque la courbe $C - C'$ n'entoure par le solénoïde. Par contre, si les deux courbes C et C' appartiennent respectivement aux classes $C[n]$ et $C[m]$, la différence de leurs

actions magnétiques sera égale à $(n-m)e\Phi_B/c$, où Φ_B est le flux magnétique passant dans le solénoïde.

Si $U_n^{(0)}$ est la contribution de la classe $C[n]$ au propagateur obtenu sans tenir compte de la partie magnétique, on peut donc écrire, modulo une phase globale,

$$\begin{aligned} U &= \sum_n U_n^{(0)} \mathrm{e}^{ine\Phi_B/\hbar c} \\ &= \sum_n |U_n^{(0)}| \mathrm{e}^{i(\theta_n + ne\Phi_B/\hbar c)} \end{aligned} \tag{1.38}$$

où nous avons introduit la phase θ_n de $U_n^{(0)}$. Il est sous-entendu que $U_n^{(0)}$ et θ_n dépendent de la coordonnée $\mathbf{r}$ sur l'écran où l'électron est observé. La probabilité que l'électron y soit observé est justement proportionnelle au module carré de U:

$$|U|^2 = \sum_n |U_n^{(0)}|^2 + 2\sum_{n<m} |U_n^{(0)} U_m^{(0)}| \cos[\theta_n - \theta_m + (n-m)e\Phi_B/c\hbar] \tag{1.39}$$

Comme les phases θ_n dépendent de $\mathbf{r}$ différemment selon n, des franges d'interférences sont observées. On passe d'une frange d'interférence à la suivante quand la différence $\theta_n - \theta_m$ passe de 0 à 2π. Le fait d'introduire un champ magnétique (et donc un flux Φ_B) déplace les franges puisque le terme $e\Phi_B/c\hbar$ modifie la position du minimum d'intensité. Lorsque le flux magnétique atteint la valeur

$$\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{e} = \frac{hc}{e} \tag{1.40}$$

appelé *quantum de flux*, le patron d'interférence retrouve son aspect initial. L'effet Aharonov-Bohm se présente donc comme un déplacement du patron d'interférence lorsqu'un champ magnétique est appliqué, ce déplacement devenant nul à chaque fois qu'un nombre entier de quanta de flux est atteint[2].

2 Mécanique statistique et champs

2.1 Rappels

La mécanique statistique s'intéresse aux propriétés moyennes d'un système prises sur un ensemble d'états. Pour des systèmes en contact thermique avec leur environnement, cet ensemble est appelé *ensemble canonique* et est caractérisé par la distribution de Boltzmann : la probabilité de trouver dans l'ensemble un état propre de l'hamiltonien avec énergie E est proportionnelle à $\mathrm{e}^{-\beta E}$, où $\beta = 1/k_B T$ est l'inverse de la température absolue. La mécanique statistique repose sur la prémisse que la moyenne prise sur l'ensemble canonique est équivalente à une moyenne spatiale sur un échantillon réel (on considère alors que l'échantillon macroscopique est formé de sous-systèmes mésoscopiques identiques, chacun étant décrit par l'ensemble canonique) ou à une moyenne temporelle (principe ergodique). La moyenne statistique d'une observable A est prise en calculant la

[2] Notons que cet effet, même s'il fait appel au potentiel vecteur, est invariant de jauge, puisque seul le flux magnétique entre en ligne de compte et que cette quantité est bien sûr invariante de jauge.

moyenne arithmétique des valeurs moyennes de A (au sens quantique du mot) dans les différents états propres :

$$\langle A\rangle = \frac{1}{Z}\sum_n \langle n|A|n\rangle \mathrm{e}^{-\beta E_n} \qquad Z = \sum_n \mathrm{e}^{-\beta E_n} \tag{2.1}$$

En fontion de l'*opérateur densité*

$$\rho = \mathrm{e}^{-\beta H} = \sum_n |n\rangle\langle n|\mathrm{e}^{-\beta E_n} \tag{2.2}$$

la moyenne statistique $\langle A\rangle$ et la fonction de partition Z s'expriment comme suit :

$$\langle A\rangle = \frac{1}{Z}\,\mathrm{Tr}\,(\rho A) \qquad Z = \mathrm{Tr}\,\rho \tag{2.3}$$

2.2 Intégration fonctionnelle et mécanique statistique

La substitution $\beta \to it$ nous fait passer de l'opérateur densité à l'opérateur d'évolution et par conséquent la représentation du propagateur par une intégrale fonctionnelle peut s'adapter facilement à une représentation similaire pour le noyau de l'opérateur de densité:

$$\rho(x_f, x_i) = \langle x_f|\mathrm{e}^{-\beta H}|x_i\rangle \tag{2.4}$$

(nous considérons pour commencer un système à un degré de liberté). L'intégrale de chemins (1.10) est adaptée à ce noyau en procédant à la substitution $t \to -i\tau$, où τ est une variable réelle allant de 0 à β. Cette substitution porte le nom de *rotation de Wick*. L'action (1.11) devient alors

$$S = i\int \mathrm{d}\tau\ \left\{\frac{1}{2}m\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 + V(x)\right\} = iS_E \tag{2.5}$$

où S_E est appelée *action euclidienne*[1]. Le noyau de ρ devient donc

$$\rho(x_f, x_i) \ = \ \int_{(x_i,0)}^{(x_f,\beta)} [\mathrm{d}x]\ \exp -S_E[x] \tag{2.6}$$

où maintenant la mesure est obtenue par le processus de limite

$$[\mathrm{d}x] \ = \ \lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N-1}\left\{\sqrt{\frac{mN}{2\pi\beta}}\mathrm{d}x_j\right\} \tag{2.7}$$

La fonction de partition peut être exprimée comme suit :

$$Z = \int \mathrm{d}x\ \rho(x,x) = \int [\mathrm{d}x]\ \exp -S_E[x] \tag{2.8}$$

où cette fois les conditions aux limites ne sont plus indiquées sur l'intégrale : toutes les trajectoires telles que $x(0) = x(\beta)$ contribuent. Ici le 'temps' τ est bien sûr fictif et n'est qu'une variable

[1] Cette terminologie provient du fait que l'espace-temps, après la rotation de Wick, possède une métrique euclidienne et non plus pseudo-euclidienne.

auxiliaire introduite pour exploiter l'analogie avec l'intégrale de chemins. La valeur moyenne d'une observable A est, quant à elle,

$$\begin{aligned}
\langle A\rangle &= \frac{1}{Z}\int \mathrm{d}x\ \langle x|\rho A|x\rangle \\
&= \frac{1}{Z}\int \mathrm{d}x\mathrm{d}y\ \langle x|\rho|y\rangle\langle y|A|x\rangle \\
&= \frac{1}{Z}\int \mathrm{d}x\mathrm{d}y \int_{(x,0)}^{(y,\beta)} [\mathrm{d}x]\ \langle y|A|x\rangle \exp -S_E[x] \\
&= \frac{1}{Z}\int \mathrm{d}x\mathrm{d}y \int_{(x,0)}^{(y,\beta)} [\mathrm{d}x]\ A(x)\delta(x-y) \exp -S_E[x] \\
&= \frac{1}{Z}\int [\mathrm{d}x]\ A(x(0))\ \exp -S_E[x]
\end{aligned} \tag{2.9}$$

Nous avons supposé que que A est une fonction de X seulement, de sorte que $\langle y|A|x\rangle = A(x)\delta(x-y)$. Cependant, dans le cas où $A = P^2$, on a $\langle y|P^2|x\rangle = -\partial_x^2\delta(x-y)$; après intégration par partie, on aurait

$$\langle P^2\rangle = \frac{1}{Z}\int [\mathrm{d}x]\ \frac{\delta^2}{\delta x(0)^2} \exp -S_E[x] \tag{2.10}$$

Notons que l'observable A est évaluée à $\tau = 0$.

2.3 Systèmes infinis

Il est rare que l'on s'intéresse à la mécanique statistique des systèmes à un degré de liberté! Le formalisme de l'intégration fonctionnelle s'étend naturellement aux systèmes ayant un nombre inifni de degrés de liberté, tel le champ scalaire $\phi(\mathbf{r}, t)$, que ce soit dans sa version dynamique (calcul de l'évolution temporelle) ou dans sa version statistique (calcul de Z). La fonction de partition est toujours

$$Z = \int [\mathrm{d}\phi]\ \exp -S_E[\phi] \tag{2.11}$$

mais cette fois la mesure d'intégration fonctionnelle $[\mathrm{d}\phi]$ est définie par un processus de discrétisation plus complexe, à la fois sur le temps (t ou τ) et sur l'espace. Par exemple, on peut définir un réseau cubique $\Gamma = \{\mathbf{n} = an_i\hat{\mathbf{e}}_i, n_i \in \mathbb{Z}\}$ où les $\hat{\mathbf{e}}_i$ sont les vecteurs unité dans les trois directions de l'espace et a est le pas de réseau. On définit alors

$$[\mathrm{d}\phi] = \lim_{\substack{a\to 0\\ N\to\infty}} \prod_{\mathbf{n}\in\Gamma}\prod_{j=0}^{N} \mathrm{d}\phi(\mathbf{n}, j/N) \tag{2.12}$$

Nous avons laissé tomber le préfacteur car il ne contribue qu'un facteur multiplicatif à Z; celui-ci est peut-être infini dans la limite continue mais il ne contribue pas aux valeurs moyennes.

Signalons que dans le cas d'un champ scalaire en dimension 3, l'action euclidienne est

$$S_E = \int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}\tau \left\{\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial\tau}\right)^2 + \frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + V(\phi)\right\} \tag{2.13}$$

où $V(\phi)$ est le potentiel du champ (une fonction de ϕ mais pas de ses dérivées).

D'un strict point de vue mathématique, la version euclidienne de l'intégrale fonctionnelle est de beaucoup préférable, car il n'est pas nécessaire d'ajouter au temps une partie imaginaire infinitésimale pour que les intégrales soient bien définies. Il est clair que l'action euclidienne est beaucoup plus grande pour les trajectoires 'rugueuses' qui s'éloignent trop de la trajectoire classique et la contribution de ces dernières aux moyennes statistiques est supprimée par un facteur exponentiel important. Notons que nous ne pouvons appliquer l'intégration fonctionnelle aussi facilement aux champs de fermions car, rappelons-le, un champ fermionique n'a d'interprétation classique qu'en fonction de variables de Grassmann. Il est cependant possible (et même très utile) de définir des intégrales fonctionnelles sur des trajectoires Grassmann (voir plus loin).

Le type de moyenne statistique qui nous intéresse le plus souvent pour des systèmes infinis est la corrélation qui existe entre deux opérateurs pris à des endroits différents, comme par exemple

$$\langle \phi(\mathbf{r},0)\phi(\mathbf{r}',0)\rangle = \frac{1}{Z}\int [\mathrm{d}\phi]\ \phi(\mathbf{r},0)\phi(\mathbf{r}',0)\exp -S_E[\phi] \tag{2.14}$$

Cette quantité est appelée *fonction de corrélation* ou, plus particulièrement dans ce cas, *fonction à deux points*, car deux points ($\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$) y sont considérés. C'est évidemment le terme $(\nabla\phi)^2$ dans $S_E[\phi]$ qui couple les champs pris à des points différents et qui fait que ces champs sont corrélés. Notons que nos deux champs sont pris à l'instant $\tau = 0$, conformément à l'interprétation statistique que nous avons démontrée. Il est néanmoins possible d'étudier des corrélations entre champs pris à des temps réels t différents (corrélations *dynamiques*) ce qui implique alors des valeurs imaginaires de τ. C'est ainsi qu'on peut définir les *fonctions de Green* si utilisées dans la théorie à N corps et dans la théorie des champs.

2.4 Limite classique

Il est remarquable que la mécanique statistique d'un système *quantique* en dimension d soit tout-à-fait semblable à la mécanique statistique d'un système *classique* en dimension $d+1$ dont l'étendu dans la $(d+1)^e$ dimension est β. L'hamiltonien de ce système classique est proportionnel à l'action euclidienne S_E du système quantique. Sa température inverse $\beta_{\mathrm{cl.}}$ n'est bien sûr pas égale à β, mais est plutôt reliée à une constante de couplage dans l'hamiltonien S_E.

Par exemple, considérons le *modèle σ non linéaire*, dont l'action est la suivante :

$$S[\boldsymbol{\varphi}] = \frac{v}{2g}\int \mathrm{d}^d r\mathrm{d}t\ \left\{\frac{1}{v^2}(\partial_t\boldsymbol{\varphi})^2 - \sum_{i=1}^{d}(\partial_i\boldsymbol{\varphi})^2\right\} \qquad (\boldsymbol{\varphi}^2 = 1) \tag{2.15}$$

Dans ce modèle, $\boldsymbol{\varphi}$ est un vecteur unitaire et g joue le rôle d'une constante de couplage. La contrainte $\boldsymbol{\varphi}^2 = 1$ fait que ce modèle est non trivial, sinon il ne s'agirait que d'un triplet de champ scalaires libres. Les équations du mouvement résultant de ce modèle ont comme solutions des ondes qui obéissent à la relation de dispersion $\omega = v|\mathbf{k}|$; la vitesse v est donc la vitesse des excitations dans ce modèle, au moins du point de vue classique. Ce modèle décrit bien les antiferroaimants dans le régime des grandes longueurs d'onde. L'action euclidienne de ce modèle est

$$S_E[\boldsymbol{\varphi}] = \frac{v}{2g}\int \mathrm{d}^d r\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\ \left\{\frac{1}{v^2}(\partial_\tau\boldsymbol{\varphi})^2 + \sum_{i=1}^{d}(\partial_i\boldsymbol{\varphi})^2\right\} \tag{2.16}$$

La fonction de partition

$$Z = \int [\mathrm{d}\boldsymbol{\varphi}][\delta(\boldsymbol{\varphi}^2 - 1)]\ \exp -S_E[\boldsymbol{\varphi}] \tag{2.17}$$

est celle du modèle quantique, mais peut être interprétée comme celle du modèle σ non linéaire classique en dimension $d+1$ où l'étendue de la dimension supplémentaire, décrite par τ, est β et l'hamiltonien (énergie de la configuration) est donné par $H[\boldsymbol{\varphi}] = gS_E[\boldsymbol{\varphi}]$. La température dans le modèle classique est alors $T_{\text{cl.}} = g$. Notons que la fonction delta dans la mesure d'intégration fonctionnelle impose la contrainte $\boldsymbol{\varphi}^2 = 1$ sur les configurations.

Rappelons que la *longueur de corrélation* ξ est définie comme la longeur au sein de laquelle les champs sont corrélés dans un modèle statistique :

$$\langle \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{r})\boldsymbol{\varphi}(0)\rangle \sim \exp -\frac{|\mathbf{r}|}{\xi} \tag{2.18}$$

Cette longueur dépend de la température et diverge à l'approche d'un changement de phase du second ordre (point critique). Dans notre système classique, il faut distinguer deux régimes, selon que ξ est plus ou moins grand que l'étendue β du système dans la direction temporelle (la $(d+1)^e$ dimension). Si $\xi < \beta$ alors la dimension supplémentaire joue véritablement son rôle. Dans le cas contraire, les degrés de liberté sont corrélés sur toute l'étendue temporelle et cette dimension supplémentaire ne joue plus de rôle dans les fluctuations. Le système classique devient alors effectivement d-dimensionnel. L'intégrale sur τ peut être faite en remplaçant l'intégrant par sa valeur moyenne sur τ et l'action euclidienne devient effectivement

$$S_E[\boldsymbol{\varphi}] \to \frac{\beta v}{2g}\int \mathrm{d}^d r\ \left\{\sum_{i=1}^{d}(\partial_i\boldsymbol{\varphi})^2\right\} \tag{2.19}$$

La fonction de partition redevient celle d'un système classique en dimension d, avec température $1/\beta$. En d'autres termes, si la température est suffisamment élevée il n'est plus nécéssaire de s'occuper de la nature quantique du problème : les fluctuations thermiques sont plus considérables que les fluctuations quantiques. Cela est également vrai si le système classique analogue en dimension $d+1$ se trouve à proximité d'un point critique à température non nulle près duquel $\xi \to \infty$.

3 Intégration fonctionnelle pour les fermions

Dans cette section nous verrons comment le formalisme de l'intégration fonctionnelle peut être étendu aux fermions. Cette extension requiert l'introduction d'entités mathématiques appelées *variables de Grassmann* (ou *variables Grassmanniennes*) qui partagent avec les opérateurs de champs de fermion la caractéristique d'être anticommutatifs.

Considérons un champ $\psi(\mathbf{r})$ représentant un ensemble de fermions dans le langage de la deuxième quantification. Pour simplifier la discussion, nous supposerons plutôt que ce champ est défini sur un réseau quelconque et porte un indice discret : nous remplacerons $\psi(\mathbf{r})$ par ψ_i. Ce champ satisfait aux relations d'anticommutation $\{\psi_i, \psi_j\} = 0$ et $\{\psi_i, \psi_j^\dagger\} = \delta_{ij}$.

Pour passer du formalisme canonique de la mécanique quantique au formalisme d'intégration fonctionnelle, nous avons besoin d'une base complète d'états qui sont états propres de la variable de configuration sur laquelle nous désirons intégrer. Par exemple, dans le cas d'un système à un degré de liberté, nous utilisons la base des positions $\{|x\rangle\}$ et nous intégrons sur les trajectoires $x(t)$ dans l'évaluation des amplitudes ou de la fonction de partition. Dans le cas d'un champ de bosons $\phi(\mathbf{r})$, nous devons également utiliser une base d'états propres $|\phi\rangle$ du champ, tels que $\hat{\phi}(\mathbf{r})|\phi\rangle = \phi(\mathbf{r})|\phi\rangle$ (nous avons temporairement placé un accent sur l'opérateur $\hat{\phi}(\mathbf{r})$ pour le distinguer de la valeur propre $\phi(\mathbf{r})$).

Pour un champ de fermion ψ_i, une telle base est impossible à trouver parmi les états physiques en raison de la relation $\hat{\psi}_i^2 = 0$. En effet, un état propre $|\psi\rangle$ de l'opérateur $\hat{\psi}_i$ serait tel que $\hat{\psi}_i|\psi\rangle = \psi_i|\psi\rangle$ et par conséquent $\hat{\psi}_i^2|\psi\rangle = \psi_i^2|\psi\rangle$, ce qui ne peut s'annuler si la valeur propre ψ_i est réelle et non nulle. Cependant, on peut élargir l'espace des états dans le but d'introduire de tels états propres; il ne s'agit pas d'une nécéssité nouvelle, car nous avons fait de même pour le système à un degré de liberté: l'espace des états engendré par la base des positions $\{|x\rangle\}$ est beaucoup plus grand que l'espace des états physiques, puisqu'il contient des états non normés. Cette fois-ci, cet élargissement de l'espace des états doit se faire en remplaçant l'espace vectoriel sur $\mathbb{C}$ que constitue l'espace des états par un espace vectoriel sur une *algèbre de Grassmann*.

Avant de procéder, il faut tout d'abord définir ces concepts et donner un sens à l'action classique en fonction de variables Grassmanniennes.

3.1 Algèbre de Grassmann

Rappelons qu'une *algèbre* est un espace vectoriel muni d'un produit. Une algèbre de Grassmann est alors un espace vectoriel (à ne pas confondre avec l'espace des états élargi mentionné ci-haut) engendré par un ensemble de n générateurs θ_i sur lesquels on a défini un produit antisymétrique :

$$\theta_i\theta_j + \theta_j\theta_i \;=\; 0 \tag{3.1}$$

Un élément quelconque de l'algèbre de Grassmann est donc un polynôme de degré 1 en ces générateurs, c'est-à-dire une expression de la forme suivante :

$$f(\theta_i) \;=\; \sum_{k=0}^{n}\sum_{i_1,\ldots,i_k}^{n} C^{(k)}_{i_1,\ldots,i_k}\theta_{i_1}\theta_{i_2}\ldots\theta_{i_k} \tag{3.2}$$

où les coefficients complexes $C^{(k)}_{i_1,\ldots,i_k}$ sont définis seulement si tous leurs indices sont différents; un ordre standard est défini sur les indices de ces coefficients. La dimension de l'algèbre de Grassmann en tant qu'espace vectoriel est égale au nombre de monômes distincts qui peuvent être construits, en l'occurence 2^n.

Par exemple, les éléments d'une algèbre de Grassmann avec un et deux générateurs sont respectivement

$$\begin{aligned} &(n=1) \qquad f(\theta) = c_0 + c_1\theta \\ &(n=2) \qquad f(\theta_1,\theta_2) = c_0 + c_1\theta_1 + c_2\theta_2 + c_{12}\theta_1\theta_2 \end{aligned} \tag{3.3}$$

Tout autre terme qu'on pourrait ajouter à ces expressions est soit redondant, soit nul.

Les générateurs d'une algèbre de Grassmann sont souvent appelés *variables Grassmanniennes* et les éléments de l'algèbre sont souvent appelés *fonctions* Grassmanniennes, car ce sont des polynômes des générateurs.

On définit une extension de la notion de conjugué complexe aux variables Grassmanniennes, avec la propriété

$$(\theta_i\theta_j)^* = \theta_j^*\theta_i^* \tag{3.4}$$

Une variables Grassmannienne est *réelle* si $\theta_i^* = \theta_i$.

En se guidant sur cette terminologie, on définit une opération de différentiation sur les fonctions de variables Grassmanniennes de la façon évidente, c'est-à-dire en traitant les générateurs θ_i comme des variables normales, sauf pour leurs propriétés d'anticommutation. Nous devons donc adopter

une convention quant à l'ordre des facteurs dans une expression différentiable : la variable de différentiation doit être amenée à la gauche de chaque monôme avant de prendre la dérivée :

$$\mathrm{d}f = \sum_i \mathrm{d}\theta_i \frac{\partial f}{\partial \theta_i} \tag{3.5}$$

Par exemple, dans le cas de la fonction $f(\theta_1, \theta_2)$ définie ci-dessus, nous avons

$$\frac{\partial f}{\partial \theta_2} = c_2 - c_{12}\theta_1 \tag{3.6}$$

Étant donné que les fonctions de variables Grassmanniennes sont au plus linéaires dans chaque variable, l'opérateur différentiel $\partial/\partial\theta_i$ est nilpotent. En fait, ces opérateurs, avec les générateurs θ_i, forment ensemble ce qu'on appelle une *algèbre de Clifford*:

$$\begin{aligned} \theta_i\theta_j + \theta_j\theta_i &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial\theta_i}\frac{\partial}{\partial\theta_j} + \frac{\partial}{\partial\theta_j}\frac{\partial}{\partial\theta_i} &= 0 \\ \theta_i\frac{\partial}{\partial\theta_j} + \frac{\partial}{\partial\theta_j}\theta_i &= \delta_{ij} \end{aligned} \tag{3.7}$$

On définit aussi l'intégration sur les variables Grassmanniennes, comme étant identique à la différentiation :

$$\int \mathrm{d}\theta_i f(\theta_1, \ldots, \theta_n) \;=\; \frac{\partial}{\partial\theta_i} f(\theta_1, \ldots, \theta_n) \tag{3.8}$$

Cette définition peut paraître insolite, mais il faut garder à l'esprit qu'il s'agit d'une intégrale définie; donc le résultat de cette intégration ne doit plus dépendre de la variable d'intégration et sa dérivée par rapport à celle-ci doit s'annuler. D'un autre côté, l'intégrale d'une dérivée s'annulle s'il n'y a pas de termes de frontière. Donc, une définition naturelle de l'intégration sur les variables Grassmanniennes devrait satisfaire aux propriétés suivantes :

$$\frac{\partial}{\partial\theta_i}\int \mathrm{d}\theta_i\; f(\theta) \;=\; \int \mathrm{d}\theta_i\; \frac{\partial}{\partial\theta_i}\; f(\theta) \;=\; 0 \tag{3.9}$$

Ces propriétés sont en fait satisfaites par la définition (3.8) en raison de la nilpotence de la dérivée. Une conséquence de cette définition est que l'intégrale multiple sur toutes les variables d'une fonction f donne toujours comme résultat le terme le plus élevé du développement :

$$\int \mathrm{d}\theta_n \ldots \mathrm{d}\theta_1\; f(\theta) \;=\; C^{(k)}_{i_1,\ldots,i_n} \tag{3.10}$$

Quant on procède à un changement de variables d'intégration $\theta_i \to \theta'_i$, la mesure d'intégration $\mathrm{d}\theta_1 \ldots \mathrm{d}\theta_n$ se transforme comme suit :

$$\mathrm{d}\theta_1 \ldots \mathrm{d}\theta_n \;=\; \left|\frac{\partial\theta'}{\partial\theta}\right| \mathrm{d}\theta'_1 \ldots \mathrm{d}\theta'_n \tag{3.11}$$

Ceci est le résultat contraire à la loi de transformation des intégrales ordinaires, dans laquelle le Jacobien intervient avec la pluissance inverse. Ce résultat provient directement de l'identification de l'intégration avec la différentiation.

Enfin, procédons au calcul d'intégrales gaussiennes de variables Grassmanniennes. Considérons premièrement l'intégrale

$$I = \int \mathrm{d}\theta_1 \dots \mathrm{d}\theta_n \ \exp -\frac{1}{2}\theta^t A \theta \tag{3.12}$$

où θ est le vecteur-colonne des θ_i, θ^t est son transposé et A est une matrice antisymétrique (autrement seule sa partie antisymétrique contribue) de dimension paire n. Le développement en série de l'exponentielle contient un nombre fini de termes (pas de sommation sur les indices répétés ici):

$$\begin{aligned} I &= \int \mathrm{d}\theta_n \dots \mathrm{d}\theta_1 \ \prod_{i<j} \exp -\theta_i A_{ij} \theta_j \\ &= \int \mathrm{d}\theta_n \dots \mathrm{d}\theta_1 \ \prod_{i<j} \left(1 - \theta_i A_{ij} \theta_j\right) \end{aligned} \tag{3.13}$$

Chacun des facteurs commute avec les autres et donc nous pouvons les ordonner en ordre de i croissant. Lorsque nous développons le produit, les termes qui survivent à l'intégration sont ceux qui contiennent chaque variable une fois exactement et qui donc contiennent $n/2$ éléments de matrice A_{ij}. Le résultat de l'intégration est donc

$$\begin{aligned} I &= \sum_{p \in S_{n-1}} \varepsilon(p) A_{1p(2)} A_{p(3)p(4)} \dots A_{p(n-1)p(n)} \\ &\equiv \mathrm{Pf}(A) \end{aligned} \tag{3.14}$$

avec les contraintes

$$p(3) < p(4) \ , \ p(5) < p(6) \ , \ \dots \quad \text{and} \quad p(3) < p(5) < p(7) < \dots \tag{3.15}$$

La notation $\mathrm{Pf}(A)$signifie *Pfaffien* de la matrice A, défini pour des matrices antisymétriques d'ordre pair. On montre sans trop de difficultés que

$$\mathrm{Pf}(A)^2 \ = \ \det A \tag{3.16}$$

L'intégrale gaussienne avec source

$$I(b) = \int \mathrm{d}\theta_1 \dots \mathrm{d}\theta_n \ \exp \left\{ -\frac{1}{2}\theta^t A \theta + b^t \theta \right\} \tag{3.17}$$

se calcule de la même façon que dans le cas de variables réelles. On procède à un changement de variables : $\theta' = \theta - A^{-1} b$; le jacobien étant unité, le résultat est

$$I(b) = I(0) \exp \frac{1}{2} b^t A^{-1} b \tag{3.18}$$

Considérons maintenant l'intégrale

$$I_2 \ = \ \int \mathrm{d}\bar{\theta} \mathrm{d}\theta \ \exp -\bar{\theta} M \theta \tag{3.19}$$

où M est une matrice $n \times n$ et où $\mathrm{d}\bar{\theta}\mathrm{d}\theta$ signifie

$$\mathrm{d}\bar{\theta}\mathrm{d}\theta \ = \ \prod_{i=1}^{n} \mathrm{d}\bar{\theta}_i \mathrm{d}\theta_i \tag{3.20}$$

Les variables θ_i et $\bar{\theta}_i$ peuvent être considérées comme conjuguées, quoique ce ne soit pas essentiel. Encore une fois, après avoir développé l'exponentielle en série, on trouve

$$\begin{aligned} I_2 &= \int \mathrm{d}\bar{\theta}\mathrm{d}\theta \ \prod_{ij} \left(1 - \bar{\theta}_i M_{ij} \theta_j\right) \\ &= \sum_{p \in S_n} \varepsilon(p) \ M_{1p(1)} M_{2p(2)} \dots M_{np(n)} \\ &= \det M \end{aligned} \tag{3.21}$$

En somme nous obtenons des résultats similaires à ceux obtenus pour les intégrales gaussiennes ordinaires, sauf que les déterminants apparaissent avec une puissance opposée.

3.2 Dynamique des variables grassmanniennes

Nous avons mentionné dans un chapitre précédent que la version classique d'un opérateur fermionique pouvait exister sous la forme d'un nombre Grassmannien. Ici nous allons préciser cette affirmation.

Considérons un ensemble discret $\{\psi_i\}$ d'opérateurs fermioniques associés à un hamiltonien $H = V(\psi)$ et obéissant à la relation de commutation générale

$$\{\psi_i, \psi_j\} \ = \ (T^{-1})_{ij} \tag{3.22}$$

où T est une matrice symétrique non singulière. Les relations d'anticommutation habituelles sont un cas particulier où les ψ_i $(i = 1, \dots, n)$ sont des opérateurs d'annihilation, les ψ_i $(i = n{+}1, \dots, 2n)$ sont des opérateurs de création et où la matrice T d'ordre $2n$ est

$$T = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ \mathbb{I} & 0 \end{pmatrix} \tag{3.23}$$

La matrice T peut cependant être différente dans d'autres systèmes, en particulier si les opérateurs ont une normalisation différente ou si les opérateurs de création et d'annihilation ont été mélangés (transformation de Bogoliubov).

La dynamique de ces opérateurs, c.-à-d. leur évolution dans le temps, est fixée par les équations de Heisenberg $\dot{\psi}_j = i[H, \psi_j]$. Nous allons maintenant écrire un lagrangien, fonction de variables Grassmanniennes θ_i, qui mène exactement aux même hamiltonien et aux mêmes équations :

$$L \ = \ \frac{i}{2} \theta_i T_{ij} \dot{\theta}_j - V(\theta) \tag{3.24}$$

(la convention de sommation s'applique). Ici les opérateurs ψ_i sont devenus des variables Grassmanniennes θ_i. La dérivée temporelle est encore un nombre Grassmannien : $\theta_i \dot{\theta}_j + \dot{\theta}_j \theta_i = 0$. Il est important ici aussi que la matrice T soit symétrique, car la partie antisymétrique de T se couple à $\theta_i \dot{\theta}_j - \theta_j \dot{\theta}_i = \theta_i \dot{\theta}_j + \dot{\theta}_i \theta_j$, qui est une dérivée totale. Le terme cinétique du lagrangien (3.24) est réel, comme on le vérifie aisément en calculant son conjugué complexe. Il est important de comprendre que le lagrangien introduit ici est aussi un nombre Grassmannien! Ce lagrangien n'est utile que pour les équations de Lagrange qui en découlent :

$$\frac{d}{\mathrm{d}t} \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}_j} - \frac{\partial L}{\partial \theta_j} = 0 \tag{3.25}$$

où

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}_j} = -\frac{1}{2} i T_{ij} \theta_i \qquad \frac{\partial L}{\partial \theta_j} = \frac{1}{2} i T_{ji} \dot{\theta}_i + \frac{\partial V}{\partial \theta_j} \tag{3.26}$$

L'équation du mouvement est donc

$$\dot{\theta}_i = -i (T^{-1})_{ij} \frac{\partial V}{\partial \theta_j} \tag{3.27}$$

Or, quand on remplace les variables classiques θ_i par les opérateurs ψ_i, cette équation coïncide avec l'équation de Heisenberg $\dot{\psi}_j = i[H, \psi_j]$ si l'hamiltonien H est égal au potentiel $V(\psi)$ et si les relations d'anticommutation utilisées dans l'équation de Heisenberg sont bien les relations (3.22). Il s'agit ici de prouver la relation

$$-i (T^{-1})_{ij} \frac{\partial V}{\partial \psi_j} = i[V(\psi), \psi_i] \tag{3.28}$$

Celle-ci se démontre de manière explicite, en considérant la forme la plus générale de V composée seulement de monômes de degrés pairs :

$$V(\psi) = \sum_{n \text{ pair}} \sum_{i_1, \cdot, i_n} C^{(n)}_{i_1, \ldots, i_n} \psi_{i_1} \cdots \psi_{i_n} \tag{3.29}$$

Il suffit alors de démontrer la relation terme à terme, ce qui se fait aisément.

Nous avons donc défini un formalisme lagrangien pour les variables Grassmanniennes, compatible avec les équations du mouvement quantiques. Signalons qu'on peut procéder de même avec un ensemble de variables Grassmaniennes complexes $\{\theta_i, \bar{\theta}_i\}$. Ici $\bar{\theta}_i$ est défini comme le conjugué complexe de θ_i, et sa version quantique est le conjugué hermitique $\psi_i^\dagger$. Le lagrangien générale est alors

$$L \;=\; i \bar{\theta}_i T_{ij} \dot{\theta}_j - V(\theta) \tag{3.30}$$

où la matrice T est maintenant hermitique : $T^\dagger = T$. L'hamiltonien est encore une fois le potentiel V, alors que les relations d'anticommutation appropriées pour les opérateurs quantiques correspondants sont

$$\{\psi_i, \psi_j\} = \{\psi_i^\dagger, \psi_j^\dagger\} = 0 \qquad \{\psi_i, \psi_j^\dagger\} = (T^{-1})_{ij} \tag{3.31}$$

Comme on peut exprimer les n variables complexes θ_i en fonction de $2n$ variables Grassmanniennes réelles, il n'y a rien ici de nouveau; il s'agit simplement d'une ré-écriture de ce qui figure plus haut.

3.3 États cohérents et intégration fonctionnelle

Nous sommes maintenant prêts à formuler l'intégration fonctionnelle pour les fermions. Considérons encore une fois notre ensemble de $2n$ opérateurs ψ_i et $\psi_i^\dagger$ obéissant aux relations (3.31). Définissons maintenant un ensemble d'états cohérents caractérisés par un ensemble de n nombres Grassmanniens complexes ξ_i, collectivement dénotés ξ:

$$|\xi\rangle \equiv \exp(\psi^\dagger T \xi) |0\rangle \tag{3.32}$$

Ces états appartiennent à un espace vectoriel étendu, défini non plus sur $\mathbb{C}$ mais sur une algèbre de Grassmann à $2n$ générateurs. Ils satisfont aux propriétés suivantes :

$$\begin{aligned} &(1.) \qquad \psi_i|\xi\rangle = \xi_i|\xi\rangle \\ &(2.) \qquad 1 = (\det T)^{-1} \int d\bar{\xi} d\xi \ |\xi\rangle \mathrm{e}^{-\xi^\dagger T \xi} \langle\xi| \\ &(3.) \qquad \langle\xi|\xi'\rangle = \mathrm{e}^{\xi^\dagger T \xi'} \end{aligned} \tag{3.33}$$

La démonstration de ces propriétés est laissée en exercice.

Étant donné un état quelconque $|\Psi\rangle$ de l'espace de Hilbert, on définit sa fonction d'onde $\Psi(\xi) = \langle\xi|\Psi\rangle$. L'évolution temporelle de cette fonction d'onde est alors

$$\begin{aligned} \Psi(\xi, t) &= \langle\xi|\mathrm{e}^{-iHt}|\Psi\rangle \\ &= (\det T)^{-1} \int d\bar{\xi}' d\xi' \ \langle\xi|\mathrm{e}^{-iHt}|\xi'\rangle \mathrm{e}^{-\xi'^\dagger T \xi'} \langle\xi'|\Psi\rangle \\ &= \int d\bar{\xi}' d\xi' \ U(t, \xi, \xi') \Psi(\xi', 0) \end{aligned} \tag{3.34}$$

où nous avons défini le propagateur

$$U(t, \xi, \xi') = (\det T)^{-1} \langle\xi|\mathrm{e}^{-iHt}|\xi'\rangle \ \mathrm{e}^{-\xi'^\dagger T \xi'} \tag{3.35}$$

qui est le noyau de l'opérateur d'évolution pour les fonctions d'ondes.

Pour un temps infinitésimal e, le propagateur se réduit à

$$U(\mathrm{e}, \xi, \xi') = (\det T)^{-1} \langle\xi| \left(1 - i\mathrm{e}V(\psi^\dagger, \psi)\right) |\xi'\rangle \ \mathrm{e}^{-\xi'^\dagger T \xi'} \tag{3.36}$$

En supposant que les opérateurs conjugués $\psi_i^\dagger$ sont à la gauche des ψ_i dans l'hamiltonien V, alors on peut appliquer la première des propriétés (3.33) et obtenir

$$\langle\xi|V(\psi^\dagger, \psi)|\xi'\rangle = V(\bar{\xi}, \xi)\langle\xi|\xi'\rangle = V(\bar{\xi}, \xi)\mathrm{e}^{\xi^\dagger T \xi'} \tag{3.37}$$

Donc, au premier ordre en e, le propagateur s'écrit

$$\begin{aligned} U(\mathrm{e}, \xi, \xi') &= (\det T)^{-1} \mathrm{e}^{\xi^\dagger T \xi'} \mathrm{e}^{-\xi'^\dagger T \xi'} \left(1 - i\mathrm{e}V(\bar{\xi}, \xi)\right) \\ &= (\det T)^{-1} \exp i\mathrm{e} \left\{ -i \frac{(\xi - \xi')^\dagger}{\mathrm{e}} T \xi' - V(\bar{\xi}, \xi) \right\} \\ &= (\det T)^{-1} \exp iS(\bar{\xi}, \xi; \mathrm{e}) \end{aligned} \tag{3.38}$$

où bien sûr $S(\bar{\xi}, \xi; \mathrm{e})$ est l'action infinitésimale pour une trajectoire dans l'espace de configuration Grassmannien allant de ξ à ξ' en un temps e. Nous avons utilisé le fait que $i\bar{\psi}_i T_{ij} \dot{\psi}_j = -i\dot{\bar{\psi}}_i T_{ij} \psi_j$.

À partir de cette expression du propagateur infinitésimal, le propagateur sur des temps finis s'obtient exactement de la même façon que pour les intégrales de chemin ordinaires. Dans la limite où la taille e des tranches de temps tend vers zéro, la mesure d'intégration s'écrit

$$(\det T)^{-1} \prod_{i,n} d\bar{\xi}_i(t_n) d\xi_i(t_n) \quad \to \quad [\mathrm{d}\bar{\xi}\mathrm{d}\xi] \tag{3.39}$$

La généralisation à un champ continu $\psi(\mathbf{r})$ est immédiate. L'amplitude de transition entre les configurations classiques $\psi_i(\mathbf{r}, t_i)$ et $\psi_f(\mathbf{r}, t_f)$ s'écrit alors

$$\langle\psi_f(\mathbf{r}, t_f)|\psi_i(\mathbf{r}, t_i)\rangle \ = \ \int [\mathrm{d}\bar{\psi}\mathrm{d}\psi] \ \mathrm{e}^{iS[\bar{\psi}, \psi]} \tag{3.40}$$

Les conditions aux limites sur cette intégration sont implicites.

Problème 3.1 *Oscillateur harmonique forcé*

Un oscillateur harmonique de masse m et de fréquence ω_0 est soumis à une force extérieure dépendant du temps $f(t)$ (par unité de masse).

a) Écrivez le lagrangien de ce système et déduisez-en les équations du mouvement pour la position $x(t)$ de l'oscillateur. Montrez que la solution générale doit avoir la forme suivante :

$$x(t) = x_0(t) - \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\tilde{f}(\omega)}{\omega^2 - \omega_0^2 + i\varepsilon} \mathrm{e}^{-i\omega t}$$

où $x_0(t)$ est une solution des équations du mouvement en l'absence de force extérieure et $\tilde{f}$ est la transformée de Fourier de $f(t)$. Quelles sont l'utilité et la signification physique de la quantité infinitésimale ε ?

b) Soit $U(y, T; x, -T)$ le propagateur du système d'un temps $-T$ au temps T, et U_0 le même propagateur en l'absence de force extérieure. Montrez que, dans la limite $T \to \infty$, on peut écrire

$$U = U_0 \exp -\frac{im}{2\hbar} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{|\tilde{f}(\omega)|^2}{\omega^2 - \omega_0^2 + i\varepsilon}$$

Quelle est la probabilité pour qu'il y ait transition de l'état fondamental vers un état excité quelconque sous l'influence de cette force ?

c) Montrez qu'on peut écrire l'exposant de l'expression précédente sous la forme suivante :

$$-\frac{im}{2\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t\mathrm{d}t' \; f(t) D(t - t') f(t')$$

où la fonction de Green $D(t)$ est donnée par

$$D(t) = \frac{1}{2i\omega_0} \left(\theta(t) \mathrm{e}^{-i\omega_0 t} + \theta(-t) \mathrm{e}^{i\omega_0 t} \right)$$

Ici $\theta(t)$ est la fonction pas :

$$\theta(t) = \begin{cases} 0 & (t < 0) \\ 1 & (t > 0) \end{cases}$$

Problème 3.2 *Propagateur d'un rotateur plan*

Considérez un rotateur plan ou, si vous préférez, une particule contrainte de se déplacer sur un cercle. La position de la particule est un angle φ défini modulo 2π et son lagrangien est $L = \frac{1}{2} m \dot{\varphi}^2$, où m est le moment d'inertie. Soit $U_c(\varphi_f, \varphi_i, T)$ le propagateur de ce système, c'est-à-dire l'amplitude de probabilité pour que la particule, en partant d'un angle φ_i à un moment donné, soit à un angle φ_f un temps T plus tard. Soit $U(x_f, x_i, T)$ le propagateur d'une particule libre de masse m se propageant sur la droite infinie.

On définit la fonction $\theta_3(z, \tau)$ (l'une des fonctions theta de Jacobi) par le développement en série suivant :

$$\theta_3(z, \tau) = \sum_n y^n q^{n^2/2} \qquad q \equiv \mathrm{e}^{2\pi i \tau} \quad , \quad y \equiv \mathrm{e}^{2\pi i z}$$

a) Démontrez la relation suivante :

$$U_c(\varphi_f, \varphi_i, T) = U(\varphi_f, \varphi_i, T) \theta_3(m(\varphi_f - \varphi_i)/T, 2\pi m/T)$$

Indice : déroulez le cercle sur la droite infinie. À un angle donné correspondent une infinité de coordonnées φ qui diffèrent par un multiple entier de 2π. Les trajectoires qui vont de φ_i à φ_f peuvent avoir des nombres d'enroulement différents, ce qui équivaut, sur la droite, à considérer une infinité de coordonnées finales possibles $\varphi_f + 2\pi n$.

b) Comment ce résultat est-il modifié si un flux magnétique Φ_B passe au travers du cercle, sans que la particule ne sente directement le champ magnétique $\mathbf{B}$?

Bibliographie

L. Ballentine, *Quantum Mechanics*, Prentice Hall, 1990. L'auteur adopte un point de vue non orthodoxe dans l'interprétation de la mécanique quantique (école des 'ensembles'). Recommandé pour la théorie de la symétrie.

G. Baym, *Lectures on Quantum Mechanics*, Benjamin/Cummings, 1969. Ce volume a fortement influencé le chapitre 7 de ce manuel.

C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Mécanique Quantique*, Paris, Hermann, 1977. Un manuel courant dans les programmes de baccalauréat, mais qui peut encore servir à la maîtrise pour fins de revision. Il décrit de multiples applications de la mécanique quantique de manière très soignée dans ses 'compléments'.

C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg, *Photons et atomes*, InterEditions/Éditions du C.N.R.S., Paris, 1987.

C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg, *Processus d'interaction entre photons et atomes*, InterEditions/Éditions du C.N.R.S., Paris, 1988. Ces livres nouveaux (celui-ci et le précédent) sont très détaillés, mais ne couvrent que l'étude du champ de radiation et son interaction avec les atomes; idéal pour les applications en physique atomique et lasers.

R.P. Feynman, A.R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, 1965. Ici figure le traitement original de l'intégration fonctionnelle.

K. Gottfried, *Quantum Mechanics*, Addison-Wesley. Un manuel à recommander pour les fondements de la mécanique quantique, la théorie de la symétrie, l'interprétation du processus de mesure.

H. Haken, *Quantum Field Theory of Solids*, Amsterdam, North-Holland, 1976. De nombreuses applications de la deuxième quantification à la physique du solide.

A. Messiah, *Mécanique Quantique*, Paris, Dunod, 1959. Utile pour la théorie des perturbations et la quantification du champ électromagnétique.

P. Ramond, *Field theory: a modern primer*, Addison-Wesley, 1990. Les deux premiers chapitres sont pertinents (groupe de Lorentz et intégration fonctionnelle).

J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley. À consulter pour l'intégration fonctionnelle, les symétries et la théorie des perturbations.

J.M. Ziman, *Elements of Advanced Quantum Theory*, Cambridge University Press, Cambridge, 1969. Beaucoup d'applications de la deuxième quantification.

Index

abélien, groupe, 33
absorption, 148
absorption, processus d', 54
absorption, section d', 152
Aharonov-Bohm, effet, 184
algèbres de Lie, 36
anharmonique, oscillateur, 61
annihilation opérateurs d', 118
annihilation, opérateur d', 66
anticommutation, relations d', 68
antiferromagnétiques, ondes de spin, 104
antiparticules, 175
antiunitaire, opérateur, 23
Auto-cohérent, méthode du champ, 81

bandes d'énergie, 91
barrière double, 12
Bethe, ansatz de, 108
Bloch, fonctions de, 91
Bogolioubov, transformation de, 110
Born, approximation de, 58
Brillouin-Wigner, série de, 44

Campbell-Baker-Hausdorff, relation de, 17
canonique
  quantification, 5, 7
canonique, ensemble, 186
canoniques, variables, 3
chaîne d'oscillateurs, 115
champ scalaire, 118
champ scalaire complexe, 135
chirale, représentation, 171
chronologique, produit, 27
Clebsch-Gordan, coefficients de, 33
Clifford, algèbre de, 170
cohérent
  état, 15
complétude
  relation de, 5
configurations, espace des, 2
corrélation, longueur de, 190
Coulomb, diffusion de, 60
couplage minimal, 145
courant conservé de Noether, 134
courant paramagnétique, 146
courant, opérateur de, 69
création opérateurs de, 118
création, opérateur de, 66
cristallographique, groupe, 34
crochets de Poisson, 3
  et commutateurs, 7

de Broglie
  longueur d'onde de, 12
demi-vie, 54
densité hamiltonienne, 120
densité lagrangienne, 119
désintégration, processus de, 53
diffusion de la lumière, 155
diffusion, théorie générale, 55
dipôle magnétique, 41
Dirac, équation de, 173
Dirac, matrices de, 170
Dirac, mer de, 174
Dirac, point de vue de, 48
Dirac, représentation de, 171
doublement connexe, espace, 37
Dyson, série de, 49

E.C.O.C., 6, 39
échange, intégrale d', 98
échelle
  opérateur d', 13
effet Casimir, 141
effet photoélectrique, 153
effet tunnel, 10
effet tunnel résonant, 12
effondrement de la fonction d'onde, 6
émission, 148
émission de phonons, 138
émission spontanée, 162
émission, processus d', 54
énergie-impulsion, tenseur, 134
espace des états, 5

espace dual, 5
état cohérent, de rayonnement, 138
états cohérent, causé par une source classique, 141
états cohérents de fermions, 195
états cohérents de spin, 41
Euler, angles d', 32
évolution temporelle, 8, 26

fermeture
  relation de, 5
Fermi, mer de, 75
Fermi, règle d'or de, 49
ferromagnétiques, ondes de spin, 101
Fock, espace de, 64
fonction d'onde, 8
  effondrement, 6
fonction d'onde, effet d'une opération de symétrie, 23
fonction d'onde, renormalisation de la, 46
fonctions propres, pour un champ, 124
force d'oscillateur, 152
formes linéaires, 5

Galilée, transformation de, 39
générateur, 24
Goldstone, mode de, 116
Goldstone, théorème de, 102
Grassmann, algèbre de, 191
Grassmann, variables de, 190
groupe de Lie, 33
groupe de Lorentz, 165
groupe, définition, 33
groupes, théorie des, 33

Haldane, gap de, 108
Hamilton, équations de, 2
Hartree, approximation de, 81
Hartree-Fock, approximation de, 80
Hartree-Fock, équations de, 84
Hausdorff, relation de, 19
Heisenberg
  équation de, 8
  point de vue de, 8
Heisenberg, modèle de, 97
Heisenberg, point de vue, 26
hermitique
  conjugué, 6
Holstein-Primakov, transformation de, 102
Hubbard, modèle de, 95

impulsion cristalline, 117
impulsion généralisée, 2
impureté, dans une chaîne d'oscillateurs, 139
incertitude
  relation, 7
incertitude temps-énergie, 51
incertitude, et états cohérents, 18
infinitésimale, transformation, 24
intégrable, système, 39
intégrale de saut, 97
intégrales de chemins, 178
interaction phonon-phonon, 139
interaction, point de vue d', 48
inversion de l'espace, 27
irréductible, représentation, 35

jauge, invariance de, 145
jauge, transformations de, 127

Lagrange, équations de, 2
Lippmann-Schwinger, équation de, 56
Lorentz, force de, 143
Lorentz, groupe de, 165

masse, terme de, 123
matrices de Dirac, 170
matrices de rotation, 31
Maxwell, équations de, 127
mécanique statistique, 186
mer de Dirac, 174
mesure
  processus de, 6
modèle σ non linéaire, 189
module d'une représentation, 34
moment cinétique, champ électromagnétique, 138
moment cinétique, composition du, 33
moment cinétique, états propres, 30
moment cinétique, théorie générale, 28
moment conjugué, définition, 2
moment magnétique de l'électron, 176

neutrinos, 170
neutrons, diffusion de, 62
Noether, théorème de, 38, 130

observable, 6
ondes de spin, 101, 102
opérateur d'évolution, 26
opérateur de rotation, 29
opérateur densité, 69, 187
opérateurs à deux corps, 77
opérateurs à un corps, 72
opérateurs de création et d'annihilation, 66
opérateurs vectoriels, 29
oscillateur fermionique, 75
oscillateur harmonique, 74
  étude classique, 4
  quantique, 13
oscillateur harmonique forcé, 197
oscillateur harmonique, propagateur, 182
oscillateurs couplés, 112

parité, 27
particule libre, propagateur, 182
Pauli, équation de, 176
Pauli, matrices de, 31
permutations, 86
permutations, groupe des, 34
phases, espace des, 3
phonon-photon, interaction, 164
phonons, 118
phonons optiques, 137
photons, 127
polarisabilité, calcul de la, 47
polarisations du photon, 129
positrons, 175
potentiel
  puits de, 9
potentiels électromagnétiques , 127
probabilité
  courant de, 9
  et mécanique quantique, 6
propagateur, 179

quadri-vecteur, 166
quantification canonique, 5
quantification, deuxième, 80
quasi-classique
  état, 15
quasi-classique, état, 18

Raman, diffusion, 158
Rayleigh-Schrödinger, série de, 46
rayonnement de freinage, 162
rayonnement dipolaire électrique, 149
rayonnement dipolaire magnétique, 163
rayonnement quadrupolaire, 163
réflexion
  coefficient de, 11
régle d'or de Fermi, 49
Reiche-Thomas-Kuhn, règle de somme de, 152
représentation d'un groupe, 34
représentation en coordonnées, 8
représentation en impulsion, 25
représentation fondamentale, 34
représentation multivoque, 37
représentation projective, 35
représentation réductible ou irréductible, 35
réseau, 89
résonance magnétique, 42
résonances, dans la diffusion, 161
résonant
  effet tunnel, 12
rotateur plan, 197
rotation et moment cinétique, 29
rotation infinitésimale, 28

Schrödinger
  point de vue de, 8
Schrödinger, champ de, 80
Schrödinger, point de vue, 26
Schur, lemme de, 35
Schwinger, bosons de, 40
section efficace de diffusion, 58
sélection, règles de, 47, 151
simplement connexe, espace, 37
Slater, déterminant de, 71
SO(n), 34
spin, moment cinétique de, 29
spinons, 108
stationnaire
  état, 8
SU(2) et SO(3), 36
SU(n), 34
super-échange, 99
symétrie, opération de, 22

tensoriel
  produit, 5
tensoriel, produit, 28
Thomson, diffusion, 156, 162
transfert
  matrice de, 10
transformation d'échelle, 132
transformation particule-trou, 174
transformations active et passive, 131
transformations infinitésimales, 132
translation, 132
translation et impulsion, 25
translation, opérateur de, 24
transmission
  coefficient de, 11

unitaire, opérateur, 23

vectoriels, opérateurs, 41
vide, énergie du, 123

Wannier, fonctions de, 93
Wick, théorème de, 82
Wigner, fonction de, 40
Wigner, fonctions de, 32
Wigner, théorème de, 23

Yukawa, potentiel de, 60

Table des Matières

Préface 1

1. Principes Fondamentaux et Revision 2

1. Rappels de mécanique classique 2
    1. Équations de Lagrange 2
    2. Équations de Hamilton 2
    3. Exemple : oscillateur harmonique simple 4
2. Quantification canonique 5
    1. Espace des états 5
    2. Observables et opérateurs 6
    3. Probabilités et processus de mesure 6
    4. Quantification canonique 7
    5. Évolution temporelle 8
    6. Représentation en coordonnées 8
3. Puits et barrières de potentiel en une dimension 9
    1. Effet tunnel et matrice de transfert 10
    2. Effet tunnel résonant 12
4. Oscillateur harmonique 13
    1. États propres et opérateurs d'échelle 13
    2. États cohérents 15
    Problèmes 19

2. Théorie de la symétrie 22

1. Opérations de symétrie 22
    1. Symétries et transformations unitaires 22
    2. Translations et représentation en impulsion 24
    3. Évolution temporelle 26
    4. Parité 27
    5. Systèmes composites 28
2. Théorie du moment cinétique 28
    1. Générateurs et moment cinétique 28
    2. États propres du moment cinétique 30
    3. Matrices de rotation 31
    4. Composition du moment cinétique 33

3. Théorie des groupes . . . 33
1. Définitions . . . 33
2. Exemples . . . 34
3. Représentations . . . 34
4. Algèbres de Lie . . . 36
5. Les groupes $SU(2)$ et $SO(3)$ . . . 36
4. Lois de conservation . . . 38
1. Théorème de Noether . . . 38
2. Écoulements de symétrie . . . 38
Problèmes . . . 39

3. Théorie des perturbations . . . 44
1. Perturbations stationnaires . . . 44
1. Série de Brillouin-Wigner . . . 44
2. Renormalisation de la fonction d'onde . . . 46
3. Exemple : polarisabilité d'un atome . . . 47
2. Perturbations dépendant du temps . . . 48
1. Point de vue d'interaction . . . 48
2. Règle d'or de Fermi . . . 49
3. Perturbation adiabatique . . . 52
4. Processus de désintégration . . . 53
5. Perturbations harmoniques . . . 54
6. Transitions du deuxième ordre . . . 55
3. Diffusion . . . 55
1. Équation intégrale de la diffusion . . . 55
2. Section efficace . . . 58
3. Section efficace et règle d'or de Fermi . . . 59
4. Diffusion de Coulomb . . . 60
Problèmes . . . 61

4. Deuxième Quantification . . . 64
1. Espace de Fock . . . 64
1. États symétrisés . . . 64
2. Opérateurs de création et d'annihilation . . . 66
3. États antisymétrisés . . . 67
4. Relations d'anticommutation . . . 68
5. Densité et nombre de particules . . . 69
6. États de base différents . . . 70
2. Hamiltonien à un corps . . . 71
1. Opérateurs à un corps . . . 72
2. États propres . . . 74
3. Gaz de bosons et de fermions libres . . . 76
3. Interaction à deux corps . . . 77
1. Opérateurs à deux corps . . . 77
2. Formulation lagrangienne . . . 79
4. Approximation de Hartree-Fock . . . 80
1. Méthode du champ auto-cohérent . . . 81
2. Théorème de Wick . . . 82
3. Équations de Hartree-Fock . . . 84
A. Permutations . . . 86
Problèmes . . . 86

5. Applications à la physique du solide . . . 89
1. Fonctions de Bloch et de Wannier . . . 89
1. Réseaux . . . 89
2. Fonctions de Bloch . . . 91
3. Fonctions de Wannier . . . 93
2. Modèle d'électrons localisés . . . 95
1. Modèle de Hubbard . . . 95
2. Échange : modèle de Heisenberg . . . 97
3. Super-échange . . . 99
3. Ondes de spin . . . 101
1. Cas ferromagnétique . . . 101
2. Cas antiferromagnétique . . . 104
Problèmes . . . 108

6. Bosons . . . 112
1. Oscillateurs couplés . . . 112
1. Oscillateurs réels . . . 112
2. Dégénérescence des fréquences . . . 114
3. Chaîne linéaire d'oscillateurs . . . 115
4. Translations et impulsion cristalline . . . 116
2. Champ scalaire . . . 118
1. Limite continue . . . 118
2. Relation de dispersion et énergie du vide . . . 121
3. Terme de masse . . . 123
4. Cas tridimensionnel . . . 124
5. Fonctions propres générales . . . 124
3. Photons . . . 127
1. Rappels d'électromagnétisme . . . 127
2. Fonctions propres . . . 128
3. Polarisations . . . 129
4. Théorème de Noether . . . 130
1. Transformations continues . . . 131
2. Transformations infinitésimales et théorème de Noether . . . 132
3. Tenseur d'énergie-impulsion . . . 134
4. Champ scalaire complexe . . . 135
Problèmes . . . 137

7. Interactions lumière-matière . . . 143
1. Hamiltonien d'interaction . . . 143
1. Force de Lorentz . . . 143
2. Couplage minimal et invariance de jauge . . . 145
3. Courant paramagnétique . . . 146
2. Émission et absorption . . . 148
1. Taux d'émission et d'absorption . . . 148
2. Rayonnement dipolaire électrique . . . 149
3. Règles de sélection . . . 151
4. Section d'absorption et règle de somme . . . 152
5. Effet photoélectrique . . . 153

3. Diffusion de la lumière . . . 155
1. Généralités . . . 155
2. Diffusion Thomson . . . 156
3. Diffusion Raman . . . 158
4. Résonances . . . 161
Problèmes . . . 162

8. Théorie relativiste de l'électron . . . 165
1. Groupe de Lorentz . . . 165
1. Rappels . . . 165
2. Algèbre de Lorentz . . . 167
2. Équation de Dirac . . . 170
1. Algèbre de Clifford . . . 170
2. Action de Dirac . . . 172
3. Modes propres . . . 173
4. Limite non relativiste . . . 175
Problèmes . . . 177

9. Méthodes Fonctionnelles . . . 178
1. Intégrales de Chemins . . . 178
1. Système à un degré de liberté . . . 178
2. Action quadratique . . . 181
3. Oscillateur harmonique . . . 182
4. Effet Aharonov-Bohm . . . 184
2. Mécanique statistique et champs . . . 186
1. Rappels . . . 186
2. Intégration fonctionnelle et mécanique statistique . . . 187
3. Systèmes infinis . . . 188
4. Limite classique . . . 189
3. Intégration fonctionnelle pour les fermions . . . 190
1. Algèbre de Grassmann . . . 191
2. Dynamique des variables grassmanniennes . . . 194
3. États cohérents et intégration fonctionnelle . . . 195
Problèmes . . . 197

Bibliographie . . . 198

Index . . . 199